



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Nukleare Sicherheitsforschung

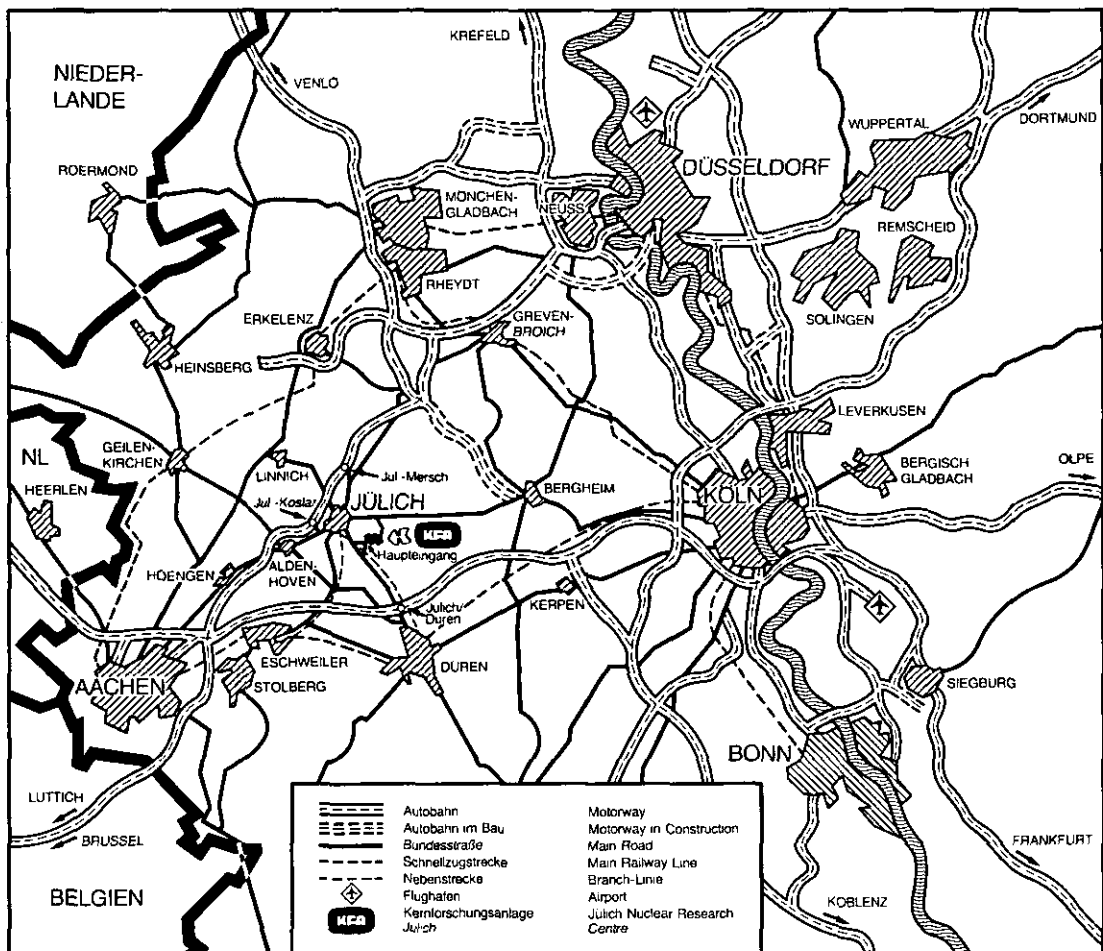
PLATO

**Ein Programm zur Berechnung
der Spaltproduktablagerung**

von
K.-D. Ehrhardt

**Jül - Spez - 135
Dezember 1981**

ISSN 0343-7639



Als Manuskript gedruckt

Spezielle Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 135
 Institut für Nukleare Sicherheitsforschung Jül - Spez - 135

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH
 Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)
 Telefon: 02461/610 · Telex: 833556 kfa d

PLATO

**Ein Programm zur Berechnung
der Spaltproduktablageung**

von
K.-D. Ehrhardt

P L A T O

EIN PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER SPALTPRODUKTABLAGERUNG

von

K.-D. Ehrhardt

KURZFASSUNG

Im vorliegenden Bericht wird ein Programm zur Berechnung der Spaltprodukt-ablagerung bei Coreaufheizstörfällen in gasgekühlten Hochtemperaturreaktoren vorgestellt. Der Bericht umfaßt die Beschreibung des physikalischen Modells und seiner Realisierung.

PLATO

A PROGRAM FOR THE CALCULATION OF PLATEOUT

by

K.-D. Ehrhardt

ABSTRACT

In the following report a program for the calculation of the plateout in a steam generator of a HTR in case of heat-up-accident is presented. The report contains both the description of the model as well as its realization.

Danksagung

Ich danke Herrn H. Krohn für zahlreiche nützliche Diskussionen. Darüberhinaus haben er und die Herren W. Jahn und W. Rehm mir durch die Bereitschaft, mit den Programmen ACORDE, FRESCO und THERMIX die erforderlichen Eingabedaten zu berechnen, sehr geholfen.

Bei Herrn G. Meister bedanke ich mich für seine Hinweise zum Manuskript, für die Überlassung der Stoffwertunterprogramme und seinem Interesse an meiner Arbeit. Frau W. Tietz danke ich für das Schreiben des Manuskripts.

Inhaltsverzeichnis

Programmkenndaten (Zusammenfassung)	
Aufgabenstellung	1
Aufgabenlösung	8
Programmaufbau	20
Daten	23
Anwendungshinweise	27
Installierung und Test des Programms	60
Anhang A	A1
Anhang B	B1
Anhang C	C1

PROGRAMMKENNDATEN

nach DIN 66 230, Ausgabe . 01/1981

Programmname(n)

PLATO

Programmsystem

Variantenbezeichnung

Versionsbezeichnung

Version 1.00

erste Version freigegeben Oktober 1981

aktuelle Version freigegeben Oktober 1981

Deskriptoren

Plateout, gasgekühlter Hochtemperaturreaktor, Coreaufheizstörfall

Aufgabe (Kurzbeschreibung, ggf. Beispiel, fachbezogene Ein- und Ausgabe, Methoden, Vorschriften, Besonderheiten)

Berechnung des (Cs-) Plateouts in einem Dampferzeuger eines gasgekühlten Hochtemperaturreaktors bei Coreaufheizstörungen.

Eingabegrößen: Länge des Dampferzeugers(DE), Durchmesser der DE-Rohre, freie Strömungsfläche, Anzahl der DE-Rohre; Adsorptions- u. Sublimationsenergie, Penetrationskoeffizient, Zerfallskonstante; Systemdruck, Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung im DE während des Störfalls, Spaltproduktfluß in den DE hinein während des Störfalls.

Ausgabegrößen: Profil der Spaltproduktkonzentration im Kühlgas, des Bedeckungsgrades und der Desorptionskonstanten; Spaltproduktfluß aus dem DE heraus, Menge der adsorbierten Atome.

Physikalisches Verfahren: Konvektion gekoppelt mit Adsorption von Metall- dämpfen; Lit.: N. Iniotakis, IB-3-79/IRB; O.Baba, in: Summary Report of Specialists Meeting on Coolant Chemistry, Plate-out and Decontamination in Gas-cooled Reactors, Jülich 2.-4.12.1980, S. 44ff.

Numerisches Verfahren:

Konvektionsgleichung: implizites Differenzenverfahren

Adsorptionsgleichung(nichtlineare gewöhnl. DGL): iterierendes, implizites Differenzenverfahren mit Exponentialanpassung; Lit.: G.Meister, Computing 13, 327-352(1974).

Bemerkungen: Es handelt sich um ein schnelles Verfahren, das für Störfall- abläufe bis ca. 1000 h geeignet ist. Diffusionsprozesse in den Wandmaterialien sind nicht berücksichtigt.

Ein Teil der Eingabedaten (Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilungen sowie der Spaltproduktfluß) wird durch die Programme ACORDE, FRESCO und THERMIX erzeugt.

Gerätebedarf						
Programmgröße	Virtueller Speicher: zwischen 148 und 156 kB; Systemspeicher: zwischen 320 und 392 kB. Länge der Loadmodulen 88 kB					
Programmbedarf	Betriebssystem					
	MVS/JES 2					
	Unterprogramme ZREAL1 u. ZREAL2 aus IMSL (8.Edition); Systemroutine MASKE *					
Sonstige Programme						
Programmiersprachen	Sprache, Sprachumfang, Anzahl der Anweisungen					
	FORTRAN: IBM-H-EXTENDED ** ; ca. 840 Statements zuzügl. 820 Kommentare					
	IBM-Assembler : 40 Statements (zuzügl. Kommentare) *					
System: 370/FORTRAN H-EXTENDED (ENHANCED), Version 1.3.0 vom 1.5.1980; Assembler IXOF00						
Betriebsarten	Stapelbetrieb Dialogbetrieb Realzeitbetrieb Sonstige Betriebsart					
<input checked="" type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>						
Dateien	Bezeichnung, Verwendungszweck	Datenträger	Datendarstellung	Dateiorganisation	Zugriffsart	
	FT05F001	Standardeing.	--	Klartext	---	sequentiell
	FT06F001	Standardausg.	--	Klartext	---	sequentiell
	FT09F001 (*)	Eing.Temperat. u. Geschwindig.	MSS/Platte /Band	Internformat	physikalisch	sequentiell
	FT10F001	Resultate, Restart	MSS/Platte	Internformat	direkter Zugriff mit Schlüssel	
	FT11F001 (*)	Eing. SP-Konz.	MSS/Platte/ Band	Internformat	physikalisch	sequentiell
weitere Dateien nach Benutzerwunsch ; (*) = Default, kann umgesetzt werden.						
Konventionen	Die Urheberrechtsbestimmungen bzgl. der IMSL-Routinen sind gegebenenfalls zu beachten.					
Zuständigkeiten (Anschriften)	Entwicklung					
	K.-D.Ehrhardt, ISF/Abt.I					
	Vertrieb					
	Pflege					
K.-D.Ehrhardt, R.Finken, ISF/Abt.I						
Weiterentwicklung						
K.-D.Ehrhardt, ISF/Abt.I						
Unterlagen	Kombiniertes Programmier- u. Anwendungshandbuch (Jü1-Spez)					
Installierungen	Hersteller	Anlagentyp	Betriebssystem	Anzahl		
	IBM	3033 U08	MVS/JES2	---		

* für den WATFIV-Compiler(V2L0, März 1980) sind Anpaßroutinen vorhanden
** es sind nur WATFIV(V2L0) kompatible Anweisungen verwendet

Funktion und Aufbau des Programms

1. Aufgabenstellung

1.1 Beschreibung

Bei gasgekühlten Hochtemperaturreaktoren werden Spaltprodukte (SP) durch das Kühlgas (He) aus dem Core heraus in den gesamten Primärkreislauf transportiert. Im Normalbetrieb beträgt der Strom der Cs-Atome bei einem PNP-500-Reaktor etwa 10^{15} Atome/sec. Bei Coreaufheizstörungen kann dieser Fluß um mehrere Größenordnungen zunehmen.

Das Programm PLATO berechnet die Ablagerung metallischer SP (wobei sich die vorliegende Version auf Cäsium beschränkt) in den Dampferzeugern (DE). Das zugrunde gelegte Modell benutzt einen Geradrohr-DE, jedoch ist das Programm im Rahmen der Unsicherheiten in den vorhandenen Eingabedaten auch für andere DE-Typen verwendbar.

Der Einfluß von Staub und Kondensationseffekten wird nicht berücksichtigt. Die Temperaturverteilung im Gas und an der Wand sowie der SP-Strom werden durch andere Programme* off-line zur Verfügung gestellt.

* ACORDE : G. Meister, Jül-Bericht in Vorbereitung

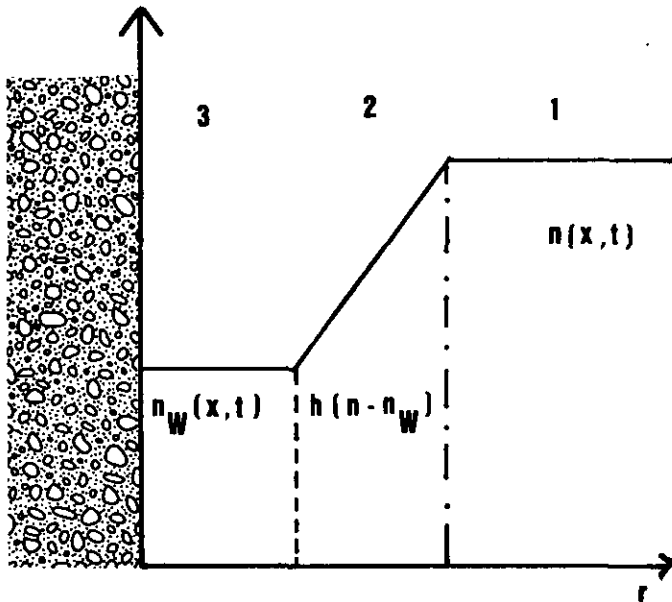
THERMIX : K. Petersen, H. Barthels, G. Breitbach,
Reaktortagung 1976

FRESCO : H. Krohn, R. Finken, M. Haben, Jül-Bericht in
Vorbereitung

1.2 Theoretische Grundlagen

In Anlehnung an /1,2/ wird folgendes Modell zugrunde gelegt:

Die Dampferzeugerrohre werden als voneinander unabhängige Oberflächen angesehen. An jeder dieser Oberflächen wird der SP-Fluß in drei Zonen betrachtet:



- Zone 1: Gebiet der Gasströmung mit einer SP-Konzentration $n(x, t)$. Diese wird radial als konstant angenommen.
- Zone 2: Übergangsschicht, in der sich die Konzentration in radialer Richtung linear ändert.
- Zone 3: Randschicht mit einer Dicke, die einer mittleren freien Weglänge der SP entspricht, unmittelbar über der Wand. Hier herrscht eine SP-Konzentration $n_w(x, t)$.

Die Wand selbst ist mit einer Schicht der Oberflächenbedeckung σ aus SP-Atomen bedeckt.

Der Strom der SP auf die Wand wird proportional zur Konzentration n_w , der Auftreffgeschwindigkeit v_L (aus der kinetischen Gastheorie) und einem Haftkoeffizienten α angesetzt. Von diesem Strom kann der Anteil $(1-\beta)$ direkt in die Wand eindringen. Der Strom der Spaltprodukte von der Oberfläche weg ist proportional der Desorptionskonstanten β und dem Bedeckungsgrad σ .

Die Desorptionskonstante $\tilde{\nu}$ ist vom Bedeckungsgrad σ abhängig. Dabei wird folgendes Bild zugrunde gelegt, das nach Langmuir /2a/ für die Sorption von Metallen auf Metallen zutreffend ist: Im Falle des Bedeckungsgrades $\sigma = 0$ wird die Sorption durch die Sorptionsenergie Q_0 bestimmt, in Falle des Bedeckungsgrades $\sigma = 1$ spielt nur noch die Sublimationsenergie Q_s eine Rolle. Zwischen diesen beiden Extrema wird eine lineare Variation angenommen:

$$Q(\sigma) = Q_0 - (Q_0 - Q_s)\sigma$$

Aus der Kinetik aktivierter chemischer Prozesse folgt dann (Elovich-Beziehung) mit einer temperaturabhängigen Konstanten $\tilde{\nu}_0$

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0(T) \exp(-Q_0/RT) \exp(Q_0 - Q_s)\sigma/RT$$

Für die Beschreibung von n wird eine Konvektionsgleichung zugrunde gelegt. Dabei ist zu beachten, daß sich die Geschwindigkeit des Kühlgases bei Abkühlung aufgrund der Dichteänderung des He ändert, obwohl der He-Massenstrom konstant bleibt.

Insgesamt erhält man:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -h \frac{0}{v} (n - n_w) - \lambda n - v(x, t) \frac{\partial n}{\partial x} - n(x, t) \frac{\partial v}{\partial x} \quad (1)$$

$$-h(n - n_w) = +\tilde{\nu}(\sigma) \sigma M_0 - \frac{\alpha v_s}{\alpha^*} n_w \quad (2)$$

$$\frac{d\sigma}{dt}(x, t) = -(\lambda + \tilde{\nu}(\sigma))\sigma + \alpha^* \beta n_w(x, t)/M_0 \quad (3)$$

mit:

$h(x, t)$ Stoffübergangskoeffizient

M_0 Anzahl der Atome Adsorbat für $\sigma = 1$

je cm^2 tatsächlicher Oberfläche

($M_0 = 4.8 \cdot 10^{14}$ Atome/ cm^2 bei Rauigkeit = 1)

$$\alpha^* = 3.63 \cdot 10^3 \sqrt{T/\text{Massenzahl}}$$

O	geometrische Oberfläche aller DE-Rohre je Längeneinheit
V	Gasvolumen im Kühlgas je Längeneinheit
λ	Zerfallskonstante

Zur Berechnung von h werden die entsprechenden Ausdrücke aus Ref. /3/ und /4/ entnommen, die Formeln für Dichte und Viskosität entstammen /5/:

$$Re = v_{gas} \cdot \rho / \mu \cdot \frac{\pi}{2} d$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

$$D = 0.1682 \cdot \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{1.65} \cdot \frac{23.83}{p} \sqrt{0.257 \cdot \left(\frac{1}{M} + 0.25 \right)}$$

$$\xi = 0.037 \cdot Re^{-0.2}$$

$$h = \frac{D}{\frac{\pi}{2} d} \cdot \frac{Re \cdot Sc \cdot \xi}{1 + 12.7 \cdot \xi \cdot (Sc^{2/3} - 1)} \cdot 1.3 \cdot \left(\frac{T_G}{T_w} \right)^{0.45}$$

μ	Viskosität des He	$[g \text{ cm}^{-1} \text{ sec}^{-1}]$
ρ	Dichte des He	$[g \text{ cm}^{-3}]$
D	Diffusionskoeffizient des SP im Kühlgas	$[cm^2 \text{ sec}^{-1}]$
d	Rohrdurchmesser	$[cm]$
M	Masse des SP in	$[g/Mol]$
T_G	Gastemperatur	$[K]$
T_w	Wandtemperatur	$[K]$
Re	Reynoldszahl	
Sc	Schmidtzahl	
p	Druck	$[bar]$
v_{gas}	Gasgeschwindigkeit	$[cm/sec]$

1.3 Geltungsbereich

Es ist vorausgesetzt, daß sich die Geometrie des Systems sowie die Materialeigenschaften der Wandmaterialien, des Kühlgases und der SP während eines Programmlaufs nicht ändern. Eine SP-Freisetzung aus den DE-Wänden ist nicht vorgesehen; eine SP-Ablagerung in den DE-Wänden ist im Rahmen eines Penetrationsmodells in Form einer unendlichen Senke berücksichtigt. Effekte, die durch Staub bedingt sind, werden nicht behandelt. Eventuelle Oberflächenschichten (z.B. Oxide) auf den DE-Rohren werden als unveränderlich während eines Programmlaufs angenommen, da sie die Materialeigenschaften ändern könnten. (Solche Änderungen werden für Coreaufheizstörfälle bis 1000 h nicht erwartet.)

Eine Umkehr der Strömungsrichtung ist zulässig; die Stoffübergangszahl wird stets nach derselben Vorschrift berechnet.

Die vorliegende Programmversion ist auf das SP Cäsium beschränkt; eine Ausweitung auf andere SP, die ein gleiches Sorptionsverhalten zeigen, ist durch einfache Modifikationen im Quelltext möglich, falls die erforderlichen Daten (insbesondere $\mathcal{V}_0(T)$) vorliegen.

1.4 Maßeinheiten

Länge	-	cm
Zeit	-	sec
Temperaturen	-	°C (eine Umwandlung in K erfolgt nur temporär, falls erforderlich)
Druck	-	bar
Geschwindigkeit	-	cm sec ⁻¹
Stoffübergangskoeffizient	-	cm sec ⁻¹
Radialgeschwindigkeit	-	cm sec ⁻¹
Desorptionskonstante	-	sec ⁻¹
Konzentration	-	Atome cm ⁻³
M ₀	-	Atome cm ⁻²
Zerfallskonstante	-	sec ⁻¹
Adsorptions-, Sublimations- energie	-	cal mol ⁻¹
allgemeine Gaskonstante	-	cal mol ⁻¹ K ⁻¹

1.5 Literatur

- /1/ N. Iniotakis et al., Nuc. Eng. Des. 34, 169 - 180 (1975)
N. Iniotakis, IB-3-79/IRB

- /2/ O. Baba, in: Summary Report of Specialists Meeting on
Coolant Chemistry, Plate-out and Decontamination in Gas-
cooled Reactors, Jülich 2.-4.12.1980, S. 44ff

- /2 a/ J.B. Taylor, I. Langmuir, Phys. Rev. 44, 423 (1933)
R.G. Wilson, J. Appl. Phys. 37, 3161 (1966)
R.G. Wilson, NASA-CR-54680 (1966)

- /3/ VDI-Wärmeatlas, 3. Auflage (1977) Kapitel G

- /4/ R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot: Transport
Phenomena (Wiley & Sons, New York, London, Sydney 1960;
Kap. 16)
W.W. Hudritsch, P.D. Smith, GA-A15501, UC-77 (1977)

- /5/ R. Harth, K. Hammeke, Jül-66-RB (Juni 1970)

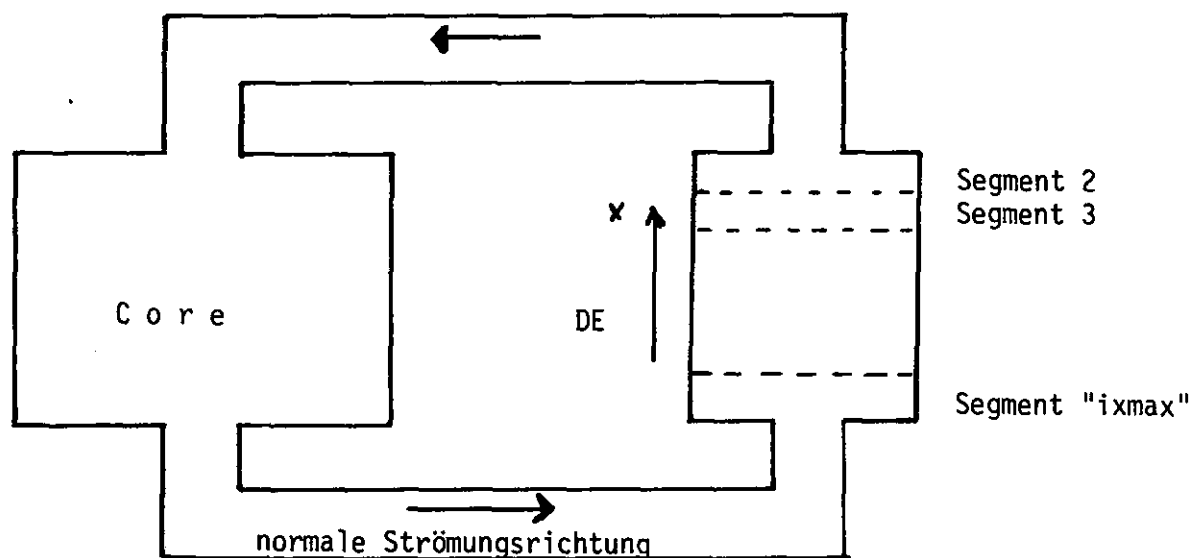
- /6/ G. Meister, Computing 13, 327 (1974)

2. Aufgabenlösung

2.1 Allgemeines

Alle nichtganzzahligen Größen werden als 64-bit-Gleitkommazahl dargestellt. (Ausnahme: im Interfaceprogramm TADAP werden 32-bit-Gleitkommazahlen eingelesen und zur Weiterverarbeitung an 64-bit-Gleitkommazahlen übergeben.)

Die Strömungsrichtung wird mit x bezeichnet. Die Numerierung der Rohrsegmente erfolgt nach dem in untenstehender Figur gegebenen Schema. Segment Nr. 2 ist fest mit dem Kaltgasende des DE (bezogen auf die normale Strömungsrichtung) verbunden.



"ix max" ist dabei die um Eins erhöhte Anzahl Rohrsegmente (Maschen). Es können bis zu 97 äquidistante Rohrsegmente behandelt werden.

Bei normaler Strömungsrichtung ("standard flow sense") erhält das (virtuelle) Segment "ix max + 1" die Eintrittskonzentration, bei umgekehrter Strömungsrichtung ("inverse flow sense") enthält das (virtuelle) Segment 1 die Eintrittskonzentration. Die Eintrittskonzentration wird aus der Gasgeschwindigkeit in der ersten realen Masche (d.h. "ix max"

bzw. "2") und dem extern berechneten SP-Strom berechnet.

Der Austrittsstrom wird aus der Gasgeschwindigkeit und der Gaskonzentration im letzten durchflossenen Segment (d.h. "2" bzw. "ix max") berechnet.

Das Interfaceprogramm TADAP paßt die x- und t-Struktur der extern berechneten Daten an die im PLATO benötigte Struktur an. Es wird lediglich eine äquidistante Aufteilung in x-Richtung sowie ein gleicher Zählsinn vorausgesetzt.

Für Zeit, Geometriedaten, Energie und Konzentration sind nur nicht-negative Werte zulässig. Eine Gültigkeitsprüfung erfolgt nicht. In der vorliegenden Version sind negative Geschwindigkeiten nicht zulässig, der Strömungssinn wird vom Flag "natcon" gesteuert. Der Wert "false" für "natcon" entspricht dem normalen Strömungssinn.

Die Zeitdiskretisierung erfolgt mit einer Schrittweite, die durch die Dateneingabe spezifiziert ist. Eine automatische Schrittweitensteuerung erfolgt nicht.

2.2 Algorithmus

Aus Gl. (2) erhält man sofort:

$$n_w = \frac{h n + \vartheta \sigma M_0}{h + \alpha^*}$$

Einsetzen in (1) bzw. (3) liefert:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \left(\lambda + \frac{o}{v} \frac{h}{h + \alpha^*} \alpha^* \right) n + \frac{o}{v} \frac{h}{h + \alpha^*} \vartheta \sigma M_0 - \lambda n + \frac{\partial (vn)}{\partial x}$$

$$\dot{\sigma} = - \left(\lambda + \vartheta \frac{h + \alpha^*(I-B)}{h + \alpha^*} \right) \sigma + \frac{B \alpha^*}{M_0} \frac{h}{h + \alpha^*} n$$

Unter Verwendung der Abkürzung $A_{x,n+1}$, $B_{x,n+1}$ und $r_{x,n+1}$ (s.u.) erhält man durch Diskretisierung

$$\frac{n_x^{n+1} - n_x^n}{\Delta t} = - A_{x,n+1} + B_{x,n+1} \vartheta_x^{n+1} \sigma_x^{n+1} + \frac{v_x^{n+1} n_x^{n+1} - v_{x-1}^{n+1} n_{x-1}^{n+1}}{\Delta x}$$

und weiter

$$n_x^{n+1} = \frac{n_x^n + v_{n-1}^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} n_{n-1}^{n+1} + B_{x,n+1} \Delta t \vartheta_x^{n+1} \sigma_x^{n+1}}{1 + A_{x,n+1} \Delta t + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

Für σ erhält man durch Integration unter der Annahme, daß die Variation der effektiven Desorptionskonstanten r_x^{n+1} und des einfallenden Teilchenstroms während eines Zeitschritts vernachlässigbar ist, sofort

$$\sigma_x^{n+1} = \sigma_x^n \exp(-r_{x,n+1} \Delta t) + \frac{B \alpha_x^{*n+1} \cdot h_x^{n+1} \cdot (1 - \exp(-r_{x,n+1} \Delta t))}{(h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}) M_0 r_{x,n+1} \Delta t} n_x^{n+1} \Delta t$$

Einsetzen dieses Ausdruckes in die Beziehung für n_x^{n+1} liefert den endgültigen Ausdruck:

$$n_x^{n+1} = \frac{n_x^x + v_{x-1}^{n+1} n_{x-1}^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + B_{x,n+1} \Delta t \vartheta_x^{n+1} \overline{\sigma}_x^n \exp(-r_{x,n+1} \Delta t)}{1 + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + A_{x,n+1} \Delta t}$$

$$x \left(1 - \frac{B_{x,n+1} \Delta t \vartheta_x^{n+1} \beta \alpha_x^* h_x^{n+1} (1 - \exp(-r_{x,n+1} \Delta t))}{(1 + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + A_{x,n+1} \Delta t) (h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}) M_0 r_{x,n+1}} \right)^{-1}$$

Da ϑ eine nichtlineare Funktion von $\overline{\sigma}$ ist, muß n_x^{n+1} iterativ gelöst werden. Die dazu benutzte Vorgehensweise ist im weiteren beschrieben.

Die Lösung des Differentialgleichungssystems erfolgt je nach Strömungsrichtung im Unterprogramm RUNP (normaler Strömungssinn) bzw. im Unterprogramm RUNNAT (inverser Strömungssinn) nach demselben Verfahren. Die getrennte Behandlung stellt die korrekte Berücksichtigung der Strömungsrichtung sicher.

Die Lösung erfolgt derart, daß die Segmente in Strömungsrichtung nacheinander abgearbeitet werden. Innerhalb eines Segments geschieht die Lösung in drei Schritten.

Schritt 1

Unter Verwendung der Desorptionskonstanten γ_x^n , die im entsprechenden Segment zum vorhergehenden Zeitschritt n berechnet wurde, wird eine (vorläufige) Konzentration \tilde{n}_x^{n+1} bestimmt. Für den Bedeckungsgrad wird dabei ein aus σ_x^n und der Sorptionsgleichung aktualisierter Wert benutzt:

$$\tilde{n}_x^{n+1} = \frac{n_x^n + v_{x-1}^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} n_{x-1}^{n+1} + B_{x,n+1} \Delta t \gamma_x^n \sigma_x^n \exp(-\tilde{r}_{x,n} \Delta t)}{1 + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + A_{x,n+1} \Delta t}$$

$$\times \left(1 - \frac{B_{x,n+1} \Delta t \gamma_x^n \beta \alpha_x^{*n+1} h_x^{n+1} (1 - \exp(-\tilde{r}_{x,n} \Delta t))}{(1 + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + A_{x,n+1} \Delta t) (h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}) M_0 \tilde{r}_{x,n}} \right)^{-1}$$

mit den Abkürzungen:

$$A_{x,n+1} = \lambda + \frac{0}{V} \frac{h_x^{n+1}}{h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}} \alpha_x^{*n+1}$$

$$B_{x,n+1} = \frac{0}{V} \frac{h_x^{n+1}}{h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}} M_0$$

$$\tilde{r}_{x,n} = \lambda + \frac{h_x^{n+1} + (1 - \beta) \alpha_x^{*n+1}}{h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}} \vartheta_x^n$$

Anmerkung: Der Index $x-1$ bezeichnet das letzte vorher durchströmte Segment und bedeutet somit nicht unbedingt die in Kapitel 2.1 eingeführte Segmentnumerierung.

Schritt 2

Mit der Konzentration \tilde{n}_x^{n+1} wird der Bedeckungsgrad σ_x^{n+1} und die zugehörige Desorptionskonstante $\tilde{\nu}_x^{n+1}$ berechnet:

$$\sigma_x^{n+1} = \sigma_x^n \exp(-r_{x,n} \Delta t) + \frac{\beta \alpha_x^{*n+1}}{h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}} \frac{h_x^{n+1}}{M_0} \frac{1 - \exp(-r_{x,n} \Delta t)}{r_{x,n} \Delta t} \tilde{n}_x^{n+1} \Delta t$$

$$\tilde{\nu}_x^{n+1} = \tilde{\nu}_{0,x}^{n+1} \exp \left[-(Q_0 - (Q_0 - Q_S) \sigma_x^{n+1}) / RT \right]$$

Daraus wird berechnet:

$$r_{x,n+1} = \lambda + \frac{h_x^{n+1} + (1 - \beta) \alpha_x^{*n+1}}{h_x^{n+1} + \alpha_x^{*n+1}} \tilde{\nu}_x^{n+1}$$

Da $\tilde{\nu}(\sigma)$ eine nichtlineare Funktion ist, muß dieser Schritt mehrfach durchlaufen werden, wobei $\tilde{r}_{x,n}$ nach dem ersten Durchlauf durch $r_{x,n+1}$ und nach jedem weiteren Durchlauf durch den neuesten Wert von $r_{x,n+1}$ ersetzt wird. In den maximal 20 ersten Durchläufen wird ein Intervallschachtelungsverfahren mit Dämpfung, in den weiteren (maximal 200) Durchläufen ein modifiziertes Newton-Verfahren (Muller's Verfahren; IMSL-Routine ZREAL1) benutzt, um eine σ - $\tilde{\nu}$ -Selbstkonsistenz zu erreichen. Die geforderte Genauigkeit beträgt entweder 11 übereinstimmende Stellen in $\tilde{\nu}$ bei zwei aufeinander folgenden Aufrufen oder eine Differenz von kleiner $10^{-6} \sigma_x^{n+1}$ zwischen σ_x^{n+1} und dem $\tilde{\nu}_x^{n+1}$ entsprechenden σ -Wert.

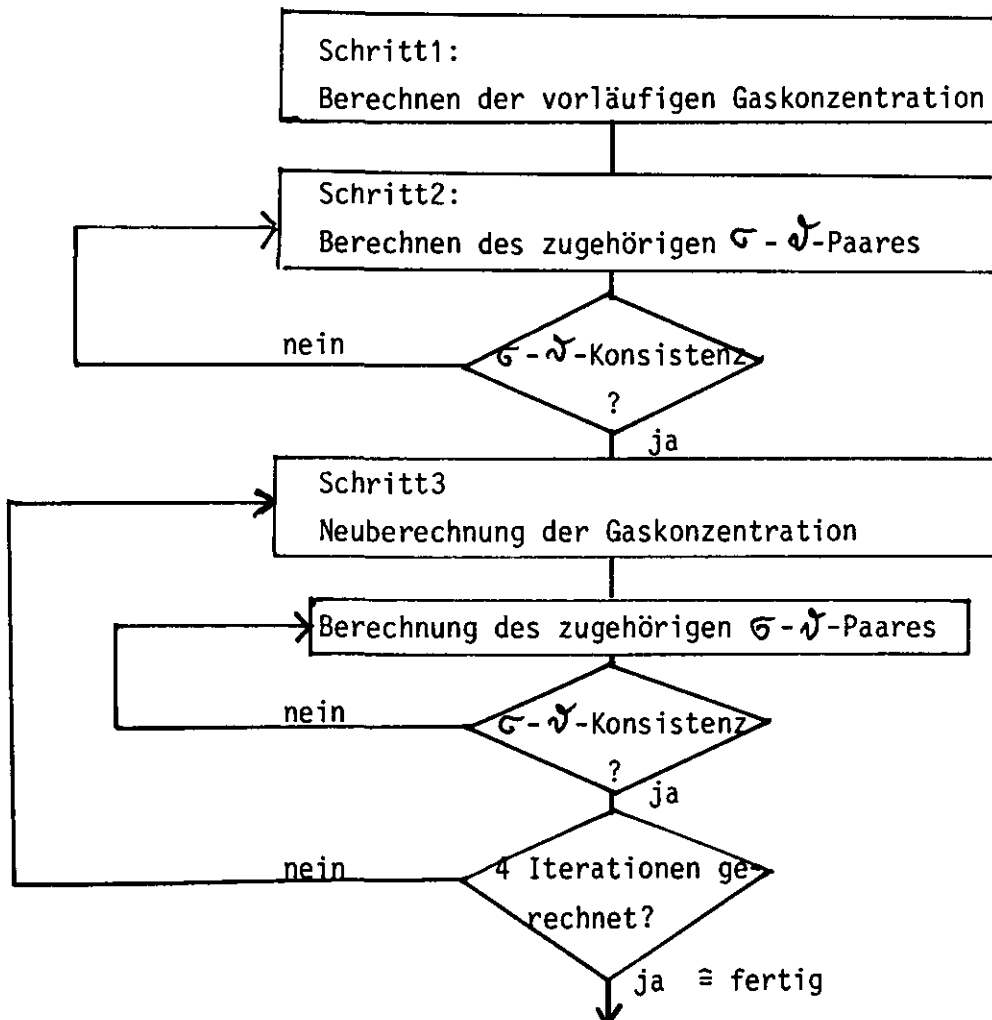
Schritt 3

Mit den neuesten Werten für σ_x^{n+1} und γ_x^{n+1} wird die endgültige Konzentration n_x^{n+1} bestimmt:

$$n_x^{n+1} = \frac{n_x^n + v_{x-1}^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} n_{x-1}^{n+1} + B_{x,n+1} \Delta t \gamma_x^{n+1} \sigma_x^{n+1}}{1 + v_x^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta x} + A_{x,n+1} \Delta t}$$

Daraus wird mit den unter Schritt 2 beschriebenen Formeln σ_x^{n+1} und γ_x^{n+1} verbessert. Die σ - γ -Selbstkonsistenz wird mit dem Newtonverfahren unter Benutzung dividierter Differenzen (IMSL-Routine ZREAL2) erreicht (Genauigkeit: 12 übereinstimmende Stellen oder eine Differenz von kleiner $10^{-7} \sigma_x^{n+1}$; maximal 175 Iterationen). Schritt 3 wird bis zu viermal durchlaufen.

Nach Abarbeitung dieser drei Schritte steht die Konzentration n_x^{n+1} im Segment x zur Berechnung der Konzentration im nachfolgend durchströmten Segment zur Verfügung. Im Programm sind die einzelnen Schritte durch Kommentarkarten eindeutig gekennzeichnet. Die Schritte sind in untenstehender Figur nochmals zusammengefaßt.



Bei dem Verfahren zur Lösung der Konvektionsgleichung wie beim Verfahren zur Lösung der Sorptionsgleichung sind damit voll implizite Methoden eingesetzt. Im Grenzfall sehr kleiner Schrittweiten, d.h. $\Delta t \ll \frac{\Delta x}{v_x}$, liefern die oben beschriebenen Ausdrücke nach Entwickeln bis zur ersten Ordnung in $\frac{\Delta x}{v_x}$ die nur in diesem Grenzfall gültige explizite Integrationsformel:

$$n_x^{n+1} = n_x^n \left(1 - v_x \frac{\Delta t}{\Delta x} - \frac{h \alpha^*}{h + \alpha^*} \frac{0}{v} \Delta t - \lambda \Delta t \right) + \\ + n_{x-1}^n v_{x-1}^n \frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{h}{h + \alpha^*} \frac{0}{v} M_0 \gamma_x^n \sigma_x^n \Delta t$$

Diese Formel entspricht physikalisch dem Sachverhalt, daß während eines Zeitschritts nur wenige Atome das Segment gewechselt haben. Im Grenzfall großer Schrittweiten, d.h. $\Delta t \rightarrow \infty$, erhält man nach Entwickeln den Ausdruck:

$$n_x^{n+1} = \frac{h}{h + \alpha^*} \frac{0}{v} \left(\gamma_x^{n+1} \sigma_x^{n+1} M_0 - \alpha^* n_{x-1}^{n+1} \right) \frac{\Delta x}{v_x} + \\ + \left(1 + \frac{v_x^{n+1} - v_{x-1}^{n+1}}{v_x^{n+1}} - \lambda \frac{\Delta x}{v_x^{n+1}} \right) n_{x-1}^{n+1}$$

Dies beschreibt den Sachverhalt, daß bei großen Zeitschrittweiten zwischen der Konzentration n_x^n und der Konzentration n_x^{n+1} keinerlei Korrelation mehr besteht. Vielmehr wird die Integration von Segment zu Segment um die Zeit $\Delta x/v_x$ zeitversetzt ausgeführt, so daß die Konzentration n_x^{n+1} aus der Konzentration n_{x-1}^{n+1} berechnet wird.

Bezeichnet $I(t)$ den effektiven Sorptionsstrom auf die Wand im Segment x und $\tilde{\lambda}$ die effektive Desorptionskonstante, so läßt sich Gleichung (3) in folgender abgekürzter Form schreiben (wenn $\tilde{\lambda}$ und I stückweise nur schwach von σ abhängen):

$$\dot{\sigma} = -\tilde{\lambda}(t) \sigma(t) + I(t)$$

Das formale Integral dieser Gleichung lautet:

$$\sigma(t) = \sigma(0) \exp\left(-\int_0^t \tilde{\lambda}(t'') dt''\right) + \int_0^t I(t') \exp\left(-\int_{t'}^t \tilde{\lambda}(t'') dt''\right) dt'$$

Die in der Numerik des Programms PLATO benutzte Integrationsvorschrift

entspricht dieser Gleichung exakt, wenn sich $\tilde{\lambda}$ und I während eines Zeitschritts nicht ändern.

2.3 Schlüsselwörter

Die Funktionssteuerung erfolgt durch (einzulesende) Schlüsselwörter aus je acht Zeichen und einer fünfziffrigen, ganzzahligen Kontrollzahl. Das erste und das achte Zeichen sind ein Stern (*).

Schlüsselwort	Bedeutung der Kontrollzahl	Wirkung
REMARK	Anzahl der Kommentarzeilen; 0 wird auf 1 umgesetzt	Die folgenden Zeilen der Eingabe werden als Kommentar behandelt
READVG	Nr. d. Eingabekanals; 0 wird auf Standardwert umgesetzt	Strömungssinn und Systemdruck werden eingelesen
READNO	wie *READVG*	Einlesen des SP-Flusses (manuell)
RUNSIM	--	Einlesen der Steuergrößen für d. Simulation u. Start der Simulation
CALLEX	--	Beenden des Programms
CABEND	--	Dump aller Commonzonen
CALLIO	--	Einlesen neuer Parameter für die I/O-Kontrolle
OPTION	--	Einlesen von Optionen
SETTIM	--	Umsetzen der Zeit
STOTIM	--	Speichern der aktuellen Zeit
RCLTIM	--	Rückruf der mit *STOTIM* gespeicherten Zeit

Die Ausführung der Programmfunktionen wird durch Optionen beeinflusst.

Die Optionssteuerung erfolgt durch Schlüsselwörter aus je acht Zeichen. Das erste und das achte Zeichen sind je ein Dollarzeichen. Die Eingabe von Optionen kann nur unmittelbar nach einem *OPTION* Befehl erfolgen. Sie wird durch die Option \$ENDOPT\$ abgeschlossen.

Schlüsselwort	Wirkung
\$NOPNOP\$	keine
\$ENDOPT\$	Abschluß der Optionenliste
\$NUPDAT\$	Die SP-Konzentration wird bei jedem Zeitschritt neu bestimmt.
\$NNOUPD\$	Die SP-Konzentration wird nicht neu bestimmt.
\$TUPDAT\$	Die Gas- u. Wandtemperaturen werden bei jedem Zeitschritt neu bestimmt.
\$TNOUPD\$	Die Gas- u. Wandtemperaturen werden nicht neu bestimmt.

Für einzelne Funktionen ist es erforderlich, daß bestimmte Optionen gesetzt oder nicht gesetzt sind, andernfalls führt dies zu einer Fehlermeldung und u.U. zum Programmabbruch.

2.4 Fehlerbehandlung

Alle vom Programm generierten Fehlermeldungen, die eine Beendigung des Programms zur Folge haben, sind mit dem Dump aller COMMON-Bereiche verbunden. Die letzte Zeile des Dumps enthält einen "Entry-Code". Dieser wird (modulo 4095) als Condition Code an das Betriebssystem zurückgegeben (nicht unter WATFIV).

Entry-Code	generiert von Unterprogramm
1001	SUBSET
1002	SUBRCL
2524	NADAP
2525	TADAP
4010	INIT
5999	CONTRL
6998 u. 6999	RUNNAT
7998 u. 7999	RUNP
9999	IOCON

Eine nähere Erläuterung der Fehlersituationen wird im folgenden versucht.

Subroutine CONTRL

```
- +++++ SORRY, S.R. CONTRL DOES NOT UNDERSTAND THE FOLLOWING
  COMMAND LINE: 'eingelesener Text'
+++++ CONTRL: EXECUTION TERMINATED
```

Die Meldung generiert den Code 5999.

/' Erforderliche Maßnahme: Überprüfen der Eingabe; u.U. fehlt *OPTION* .

```
- +++++ ERROR: END/ERR-CONDITION FULLFILLED DURING ATTEMPT TO READ
  VGAS/PGAS FROM UNIT 'Zahl'
+++++ CONTRL: IRC WAS 499, CONTRL RETURNS TO MAIN
```

Erforderliche Maßnahme: Eingabedaten überprüfen.

```
- +++++ ERROR: END/ERR-CONDITION FULLFILLED DURING ATTEMPT TO READ
  PARAMETERS FOR RUNP
```

+++++ CONTRL RETURNS TO MAIN

Erforderliche Maßnahme: Eingabedaten überprüfen.

Subroutine_IOCON_

+++++ ERROR DURING CHANGE OF IO-UNITS

+++++ IOCON EXECUTION TERMINATED

Die Meldung generiert den Code 9999.

Ursache: Beim Versuch I/O-Kanalzuweisungen einzulesen wurden keine Daten gefunden. Es wird hier nicht geprüft, ob die Kanalnummern zulässig sind.

Subroutine_INIT

+++++ ERROR: END/ERROR-CONDITION FULLFILLED DURING ATTEMPT TO READ FROM UNIT 'Zahl'

+++++ JOB WILL BE TERMINATED

Die Meldung generiert den Code 4010.

Ursache: Fehlende Daten beim Lesen des 2.Satzes (Schrittweite, Durchmesser, freie Strömungsfläche) der Datei mit den Temperatur- und Geschwindigkeitsfeldern.

Subroutine_NADAP_

Entry-Code 2524 (ohne weitere Fehlermeldung): Für die geforderte Zeit befindet sich der SP-Strom nicht auf der Datei, die dem Kanal INPN zugeordnet ist oder die Datei müßte zurückgespult werden ($\hat{=}$ Zeit läuft rückwärts!). Möglicherweise ist die falsche Datei angeschlossen oder ein *SETTIM* -Befehl falsch benutzt. Details sind einem Speicherauszug zu entnehmen, eventuell ist der Programmablauf mit PRINTLEVEL 5 zu wiederholen (u.U. auch Restart).

Subroutine_RUNNAT/RUNP

+++++WARNING: NON ZERO RETURN CODE FROM ZREAL 'ier' 'itmax'

+++++WARNING: PRINTLEVEL CHANGED TO 5

+++++WARNING: PARAMETERS AN(I), SIGMA(I), THETA(I) RESTORED TO OLD VALUES

+++++WARNING: EXECUTION WILL BE TERMINATED AFTER RERUN OF THIS STEP, STEPNUMBER IS 'segmentnummer' ('durchlaufnummer')

Die Meldung generiert in Schritt 2 der Integration in RUNNAT (RUNP) den Code 6998 (7998), in Schritt 3 den Code 6999 (7999). Die Durchlaufnummer wird nur in Schritt 3 ausgegeben.

Ursache: Die ϵ - δ -Selbstkonsistenz wurde nicht erreicht. Möglicherweise wurden zu schlechte Startwerte oder eine zu große Zeitschrittweite benutzt. Weitere Informationen können dem IMSL-Handbuch entnommen werden.

Subroutine SUBOPT

- +++++ ERROR: UNKNOWN OPTION 'text', OPTION IGNORED.

Ursache: eine unbekannte Option wurde verlangt. Möglicherweise wurde \$ENDOPT\$-Karte vergessen und dadurch Funktionssteuerbefehle als Option interpretiert.

- +++++ ERROR: A NUPDAT/TUPDAT-REQUEST IS NOT POSSIBLE AFTER A STOTIM-REQUEST OR MUST BE PRECEDED BY A RCLTIM-REQUEST, OPTION IGNORED.

Ursache: unzulässige Kombination von Optionen und Funktionen.

Subroutine SUBRCL

+++++ ERROR: A RCLTIM-REQUEST MUST BE PRECEDED BY A STOTIM-REQUEST
--- EXECUTION TERMINATED.

Ursache: fehlender vorausgehender STOTIM-Befehl.

Der Fehler generiert den Code 1002.

Subroutine SUBSET

+++++ ERROR: A SETTIM-REQUEST MUST BE PRECEDED BY NNOUPD AND TNOUPD REQUESTS --- EXECUTION TERMINATED.

Der Fehler generiert den Code 1001.

Ursache: unzulässige Kombination von Optionen und Funktionen.

Subroutine TADAP

Entry Code 2525 (ohne weitere Fehlermeldung): Für die geforderte Zeit befindet sich die Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung nicht auf der Datei, die dem Kanal INPT zugeordnet ist oder die Datei müßte zurückgespult werden. Weitere Informationen: s. Subroutine NADAP.

3. Programmaufbau

3.1 Programmstruktur und Programmbausteine

Die Programmstruktur ist in der Übersicht auf der nächsten Seite in Form eines Organisationsschemas dargestellt. Die Übersicht enthält alle Unterprogramme (Namen in Großbuchstaben, z.B. RUNP) mit Kennzeichnung der verschiedenen Entries der Subroutinen NADAP ((0) \equiv NADAP0, (T) \equiv NADAPT) und TADAP ((0) \equiv TADAP0, (T) \equiv TADAPT). Darüberhinaus ist bei jeder Routine markiert, auf welche COMMON-Zonen sie zugreift (z.B. Subroutine SUBSET *Io, Optton, Univ*). Bei der Subroutine ABEND ist desweiteren markiert, welcher Entry-Code durch welches Unterprogramm generiert wird.

ZREAL1 und ZREAL2 sind IMSL-Programme, MASKE eine Systemroutine. CCCODE ist in IBM Assemblersprache programmiert. Für MASKE und CCCODE sind Fortranroutinen vorhanden, sodaß das Gesamtprogramm auch unter WATFIV lauffähig ist.

Die Lösung der Differentialgleichungen erfolgt - wie in 2.2 beschrieben - in den Routinen RUNP, RUNNAT, ZREAL1, ZREAL2 und FTH.

Die Routinen NADAP und TADAP sind die Interfaceprogramme, die den Output der off-line berechneten Eingabedaten zugänglich machen. VFUNC berechnet die Stoffübergangskoeffizienten. Dazu stellen GDENS bzw. GVISC die He-Dichte bzw. He-Viskosität zur Verfügung.

Subroutine RSTART realisiert einen eventuellen Restart. Das Unterprogramm CONTRL steuert den gesamten Programmablauf, nachdem die Routinen IOCON (Kanalzuweisungen und Printlevel) und INIT (Initialisierungen) durchlaufen sind. Die Programme SUBOPT, SUBRCL, SUBSET und SUBSTO sind Hilfsprogramme, das Unterprogramm ABEND druckt den Inhalt der COMMON-Zonen Calc, Ftact, Geom, Io und Univ aus.

Obersicht über die COMMON-Bereiche

Name	Inhalt
<i>Io</i>	I/O-Kanäle, Printlevel, Zeiger für DA-Datei
<i>Geom</i>	Geometriedaten
<i>Univ</i>	universelle Kenngrößen
<i>Calc</i>	spezielle Kenngrößen für einen Zeitschritt
<i>Ftact</i>	spezielle Kenngrößen für einen Zeitschritt und ein Segment (dient zur Kommunikation zwischen RUNP/RUNNAT und FTH)
<i>Adapt</i>	Kenngrößen der Interfacerroutinen, z.Zt. nur von TADAP benutzt
<i>Optton</i>	Optionssteuerung

Die Auflistung des Programms ist in Anhang A gegeben.

Eine Binder-/Loaderliste mit allen Modul- und Entrynamen ist in Anhang B gegeben. Module, die aus der IMSL-Library oder einer Systembibliothek entnommen sind, werden darin mit einem * hinter dem Namen gekennzeichnet.

4. Daten

4.1 Eingabedaten

Über den jeweils definierten Standardeingabekanal sind vom Benutzer einzulesen (Standardeingabekanal für die 1. Zeile ist Kanal 5):

erste Eingabezeile (im Format 5I3, in Klammern Defaultwerte):

Die Nummer des (neuen) Standardeingabekanals, die Nummer des Standardausgabekanals (6), der Ausgabelevel (1), die Nummer des Eingabekanals für Temperaturen und Geschwindigkeiten (9), die Nummer des Eingabekanals für den SP-Fluß (11)

zweite Eingabezeile (formatfrei, Leertaste (X'40') ist Trennungszeichen):

Startzeit, Länge der DE-Rohre, Adsorptionsenergie Q_0 , Sublimationsenergie Q_S , Zerfallskonstante λ , Anzahl der Segmente, β , Anzahl der Rohre im DE, Systemdruck

Eine negative Startzeit wird als Restartanforderung interpretiert. Im Falle einer nichtnegativen Startzeit folgen jetzt segmentweise, beginnend mit Segment 2 die Startwerte für die SP-Konzentration im Kühlgas n_x^0 und für den Bedeckungsgrad σ_x^0 in formatfreier Eingabe. Bei einem Restart werden diese Werte von der Restartdatei gelesen.

Danach erfolgt die Eingabe der Befehle, die zur Programmsteuerung dienen, wie sie in Kapitel 2.3 vorgestellt sind.

Bei den Befehlen *READNO* (SP-Konzentration im Kühlgas), *READVG* (Strömungssinn, Systemdruck), *RUNSIM* (Zeitschrittweite, Anzahl der Zyklen, Druckersteuerung) und *SETTIM* (neuer Wert der Zeit) sind in der auf den Befehl folgenden Zeile die in Klammern angegebenen Werte formatfrei einzugeben. Beim Befehl *IOCON* erfolgt die Eingabe wie unter 'erster Eingabezeile' beschrieben. Bei *REMARK* entscheidet das erste Zeichen einer jeden Zeile darüber, ob der Kommentar im Output gedruckt wird oder nicht (N), das zweite Zeichen dient zur Vorschubsteuerung, wenn eine Druckausgabe gewünscht ist (d.h. erstes Zeichen \neq N).

Struktur der Datei mit den Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilungen:

1.Satz: 40 Zeichen Klartext (Format 40A1)

2.Satz: Anzahl der Einteilungen des Dampferzeugers in CORDE (externes Programm), Durchmesser der DE-Rohre in m (Real*4), freie Strömungsfläche in m² (Real*4)

alle weiteren Sätze: Zeit (Real*4), Nummer der Stützstelle (Integer*4), Heizfläche, Gasgeschwindigkeit, Gastemperatur, Wandtemperatur (alle Real*4)

Alle Sätze außer Satz 1 sind im Internformat beschrieben.

Dateibeschreibung: DCB=(RECFM=VBS,LRECL=84,BLKSIZE=8400)

Struktur der Datei mit dem SP-Fluß (wenn nicht anders vermerkt, handelt es sich um Real*8 Größen in Internformat):

1.Satz: 30 Real*4-Zahlen mit Alphatext zur Kennzeichnung

alle weiteren Sätze: Zeit, SP-Fluß aus dem Core heraus am unteren Ende des Cores, SP-Fluß aus dem Core heraus am oberen Ende des Cores

Dateibeschreibung: DCB=(RECFM=VS,LRECL=X,BLKSIZE=13000)

Struktur der Restartdatei (Fortrankanal 10, alle Angaben in Internformat):

1.Satz: Nummer des zuletzt beschriebenen Satzes, Anzahl der bearbeiteten Zyklen, Zeit

alle weiteren Sätze: Zeit, Konzentrationen, Bedeckungsgrade, Gastemperaturen, Wandtemperaturen Desorptionskonstanten jeweils aller maximal möglichen 100 Segmente (einschl. virtueller Segmente)

Dateibeschreibung: DCB=(RECFM=VB,LRECL=4008,BLKSIZE=4012)

Die Dateibeschreibung ist mit der DEFINE FILE Anweisung im Programm selbst kompatibel: DEFINE FILE 10 (100,1002,U,IDWRO).

Anmerkung: Das Verhältnis von wahrer und geometrischer Oberfläche ist im Quelltext als "1" fixiert. Dadurch wird qualitativ die Anwesenheit anderer SP berücksichtigt. Soll dies geändert werden (nicht empfohlen!), muß im Quelltext der Wert der Zahl M_0 entsprechend geändert werden.

4.2 Ausgabedaten

Die hier gegebene Beschreibung der Ausgabedaten beschränkt sich auf die Normalausgabe, d.h. den Printlevel 1 (Standardannahme).

Die erste Programmnachricht informiert über die Zuordnung der Ein-/Ausgabekanäle, soweit von den Standardwerten abgewichen wird.

Es folgen Informationen über die Anfangszeit (Nullpunkt) der Simulation, das Maschennetz, das bei der (offline durchgeführten) Berechnung der Temperaturen und Geschwindigkeiten benutzt wurde, die Anzahl der Rohre im DE sowie die freie Strömungsfläche.

Danach werden die Kenntexte der Temperatur-/Geschwindigkeitsberechnung und der SP-Freisetzungsrechnung sowie Nachrichten gedruckt, welchen "Zeitblöcken" auf den zugehörigen Dateien, die Anfangswerte der Temperaturen, Geschwindigkeiten und der Freisetzungsrate entnommen sind.

Danach wird die Anzahl der durchflossenen Segmente und die SP-Konzentration im Kühlgas, der Bedeckungsgrad, die Desorptionskonstante, die Gas- u. Wandtemperatur sowie die Radialgeschwindigkeit α^* zur Anfangszeit in jedem Segment aufgelistet.

Anschließend werden Rohrdurchmesser, Rohrlänge, Adsorptions- und Sublimationsenergie, die Nuklidmassenzahl und der Penetrationskoeffizient als Kenngröße ausgedruckt.

Danach folgen selbsterklärende Informationen, die von den eingegebenen Befehlen abhängig sind. Für Fehlermeldungen sei auf Kapitel 2.4 verwiesen.

Der Resultatausdruck erfolgt segmentweise, beginnend mit Segment 2 in der Reihenfolge:

- SP-Konzentration
- Bedeckungsgrad
- Desorptionskonstante
- Gastemperatur
- Wandtemperatur
- Gasgeschwindigkeit.

Nach dem letzten Segment quittiert das Programm die Sicherung des letzten Zeitschritts in der Form:

IDWR 'zahl1' = 'zahl2' sec. SUCCESSFULLY PROCESSED

'zahl1' bezeichnet dabei die Satznummer auf der Restartdatei, 'zahl2' die Simulationszeit. Diese Meldung erfolgt auch, wenn der Resultataus-

druck durch den dritten Parameter beim *RUNSIM* -Befehl unterdrückt ist. Danach erfolgt eine Angabe über die Anzahl der adsorbierten Atome und den Fluß hinter dem letzten durchströmten Segment.

Das genaue Verständnis des Druckoutputs bei höherem Printlevel verlangt in der Regel ein genaues Studium des Quelltextes, da vielfach auf programminterne Namen Bezug genommen wird. Die verwendeten mnemonischen Abkürzungen ermöglichen jedoch meist eine einfache Identifizierung.

Die Ausgabe auf die Restartdatei ist unter Kapitel 4.1 Eingabedaten beschrieben.

Temporäre Dateien (DIN 66205 T3) sind nicht benutzt. Die Bedeutung der Variablen und Konstanten ist im Quelltext durch Kommentarkarten beschrieben. In der Regel wurden die Namen so gewählt, daß der Zusammenhang zum mathematischen Kurzzeichen aus Kapitel 1 und 2 oder zur physikalischen Bedeutung erkennbar ist.

5. Anwendungshinweise

5.1 Anwendungsgrenzen

Das Programm bearbeitet bis zu 97 Segmente. Die Datensicherung auf der Restartdatei ist auf die letzten 98 Zeitschritte beschränkt.

5.2 Beispiel

Zunächst wird auf den folgenden Seiten eine Auflistung aller für den Beispiellauf erforderlichen Karten einschließlich der Steuerkarten für das Betriebssystem (MVS/JES2) wiedergegeben.

Die Eingabedatensätze ACORD0 und PLAOUT sind vorher von den Programmen ACORDE bzw. FRESCO beschrieben worden. Die gewählte Form der Steuerkarten schließt jegliches (beabsichtigtes oder versehentliches) Überschreiben dieser Dateien durch einen PLATO-Lauf aus. IOUTIC ist die Restartdatei. Falls diese nicht bereits existiert, muß in der zugehörigen DD-Karte statt 'DISP=(OLD,PASS)' codiert werden: 'DISP=(NEW,CATLG)'.

Durch die erste Datenzeile (d.i. die Zeile nach //G.DATEN DD *) wird Kanal 15 als Standardeingabekanal und Kanal 16 als Standardausgabekanal neu definiert. Die zweite Eingabezeile im Sinne der Beschreibung der Eingabedaten (Kapitel 4.1) beginnt somit hinter der Karte //G.SYSIN15 DD * mit der Startzeit (150 sec.), der Länge der DE-Rohre (2000 cm), der Adsorptionsenergie ($55\,000\text{ cal mol}^{-1}$), der Sublimationsenergie ($20\,000\text{ cal mol}^{-1}$), der Zerfallskonstanten λ (0), der Anzahl der durchflossenen Segmente (61), β (1, d.h. der Penetrationskoeffizient $1 - \beta$ ist 0), der Anzahl der Rohre im DE (1012.) und dem Systemdruck (40 bar).

Die Eingabe wird durch die Anfangswerte für die SP-Konzentration im Kühlgas und für den Bedeckungsgrad σ fortgesetzt. Die erste Zeile enthält die Werte für das Segment 2, die Eingabe für das Segment 62 (Anzahl der durchflossenen Segmente + 1) schließt diesen Teil der Eingabe ab.

Es folgt die Eingabe der Kommandos, ihre Bedeutung ist jeweils durch *REMARK* -Karten erklärt. Durch einen *CALLEX*-Befehl wird der Programmablauf regulär beendet.

[illegible]


```
*REMARK*00000
P1 JETZT WIRD DIE ZEIT AUF 2 STD. VORGESTELLT.
*SETTIM*
7200.
*REMARK*000004
P1 UM JETZT DIE ZUR ZEIT 7200 SEC. GUELTIGE TEMPERATUR ZU LESEN.
P WIRD NUN DIE OPTIGN TUPOAT GESETZT UND EIN ZEITSCHRITT GE-
P RECHNET.
P1
*OPTIGN*
$TUPDAT$
$ENDOPT$
*RUNSIM*
0.0001 1 1
*REMARK*000004
P1 JETZT WIRD DER PRINTLEVEL AUF 5 UMGESETZT, EIN DURCHLAUF
P MIT DIESEM LEVEL GERECHNET UND DER PRINTLEVEL ZURUECKGESETZT.
P (NUR ZUR DEMONSTRATION)
P1
*CALLIO*
000000005
*RUNSIM*
0.001 1 1
*CALLIO*
000000001
*REMARK*000004
P1 AM ENDE DES PROGRAMMABLAUFS IST ES MOEGlich. DIE ZEIT BIS VOR
P DEN ANFANGSZEITPUNKT ZURUECKZUSETZEN. WENN DIE OPTIGNEN $NNQUPDS
P UND $TNQUPDS WIRKSAM SIND.
P1
*OPTIGN*
$TNQUPDS
$ENDOPT$
*SETTIM*
140.
*REMARK*
P1 ENDE DES BEISPIELS-----ENDE DES BEISPIELS
*CALLEX*
/*
```

Die folgenden Seiten umfassen eine Auflistung, wie sie sich für den Standardausgabekanal 16 ergibt. Über den ursprünglichen Standardausgabekanal 6 liefen die Meldungen:

INPUTCHANNEL INP5 5 NOW CHANGED TO 15

OUTPUTCHANNEL DUT6 6 NOW CHANGED TO 16

Der Beispiellauf enthält zum Abschluß Meldungen wie sie beim Print-level 5 auftreten.

STARTTIME OF THIS RUN IS 150.000 SEC
UNUMBER OF X-STEPS ON TAPE (TEMPERATURES) IS 50
NUMBER OF PIPES: 1012. FREE CROSS SECTION: 0.678 M2
PNP 500 GERADROMER-DAMPFERZEUGER TEST L
CS-FREISETZUNG AUS PNP500 BEI UNGEHRINDERTER COREAUFWERZUNG MAX. ADSORPTIONSISOTHERM NACH SORS • SONST STANDARD
TADAP: TIME,TTOT,TIMEH (IN SEC.): 0.0 150.000 500.000
NADAP: TIME,TTOT,TIMEH (IN SEC.): 0.0 150.000 300.000
NADAP: AN(1),AN(IMAX+1) THIS STEP: 0.90023442D-04 0.33502188D-03
***** PLATE-OUT-PROGRAM VERSION 1.00 *****

NUMBER OF X STEPS 61

AN	SIGMA	THETA	TEMPG	TEMPH	ALPHA
2	0.100D+08	0.746D+00	0.286D+00	291.73	0.650D+04
3	0.100D+08	0.736D+00	0.335D+00	296.96	0.655D+04
4	0.100D+08	0.724D+00	0.415D+00	303.53	0.661D+04
5	0.100D+08	0.712D+00	0.503D+00	309.97	0.668D+04
6	0.100D+08	0.700D+00	0.599D+00	316.28	0.674D+04
7	0.100D+08	0.689D+00	0.726D+00	322.47	0.680D+04
8	0.100D+08	0.680D+00	0.821D+00	327.22	0.685D+04
9	0.100D+08	0.670D+00	0.958D+00	333.18	0.691D+04
10	0.100D+08	0.660D+00	0.119D+01	339.02	0.696D+04
11	0.100D+08	0.650D+00	0.140D+01	344.74	0.702D+04
12	0.100D+08	0.640D+00	0.163D+01	350.35	0.707D+04
13	0.100D+08	0.630D+00	0.169D+01	354.66	0.711D+04
14	0.100D+08	0.620D+00	0.191D+01	360.06	0.716D+04
15	0.100D+08	0.610D+00	0.214D+01	365.35	0.721D+04
16	0.100D+08	0.630D+00	0.618D+01	370.53	0.726D+04
17	0.100D+08	0.550D+00	0.734D+00	375.62	0.730D+04
18	0.100D+08	0.550D+00	0.110D+01	380.60	0.735D+04
19	0.100D+08	0.550D+00	0.150D+01	384.42	0.738D+04
20	0.100D+08	0.550D+00	0.218D+01	389.22	0.743D+04
21	0.100D+08	0.550D+00	0.313D+01	393.92	0.747D+04
22	0.100D+08	0.550D+00	0.443D+01	398.52	0.751D+04
23	0.100D+08	0.550D+00	0.617D+01	403.04	0.755D+04
24	0.100D+08	0.550D+00	0.792D+01	406.51	0.758D+04
25	0.100D+08	0.550D+00	0.108D+02	410.86	0.762D+04
26	0.100D+08	0.550D+00	0.134D+02	415.15	0.765D+04
27	0.100D+08	0.500D+00	0.356D+01	419.49	0.766D+04
28	0.100D+08	0.500D+00	0.364D+01	424.01	0.766D+04
29	0.100D+08	0.500D+00	0.372D+01	428.74	0.766D+04
30	0.100D+08	0.500D+00	0.379D+01	432.67	0.767D+04
31	0.100D+08	0.500D+00	0.388D+01	437.86	0.767D+04
32	0.100D+08	0.500D+00	0.398D+01	443.31	0.767D+04
33	0.100D+08	0.500D+00	0.408D+01	449.02	0.766D+04
34	0.100D+08	0.500D+00	0.419D+01	455.00	0.766D+04
35	0.100D+08	0.450D+00	0.429D+01	459.94	0.768D+04
36	0.100D+08	0.450D+00	0.106D+01	465.50	0.769D+04
37	0.100D+08	0.450D+00	0.110D+01	473.39	0.769D+04
38	0.100D+08	0.450D+00	0.113D+01	480.61	0.769D+04
39	0.100D+08	0.450D+00	0.117D+01	488.18	0.770D+04
40	0.100D+08	0.450D+00	0.121D+01	496.11	0.770D+04
41	0.100D+08	0.450D+00	0.125D+01	502.70	0.770D+04
42	0.100D+08	0.450D+00	0.135D+01	511.41	0.771D+04
43	0.100D+08	0.450D+00	0.140D+01	520.54	0.771D+04
44	0.100D+08	0.450D+00	0.141D+01	530.12	0.772D+04
45	0.100D+08	0.450D+00	0.147D+01	540.17	0.772D+04
46	0.100D+08	0.450D+00	0.153D+01	548.46	0.773D+04
47	0.100D+08	0.450D+00	0.160D+01	559.49	0.773D+04
48	0.100D+08	0.450D+00	0.168D+01	571.05	0.774D+04
49	0.100D+08	0.450D+00	0.240D+01	582.98	0.778D+04
50	0.100D+08	0.450D+00	0.634D+01	594.80	0.790D+04
51	0.100D+08	0.450D+00	0.243D+02	605.81	0.808D+04
52	0.100D+08	0.450D+00	0.464D+02	614.02	0.817D+04
53	0.100D+08	0.450D+00	0.994D+02	624.14	0.827D+04

57	0.1000+08	0.3000+00	0.3460+02	658.69	502.08	0.8630+04
58	0.1000+08	0.3000+00	0.6080+02	666.88	517.05	0.8720+04
59	0.1000+08	0.3000+00	0.1020+03	674.72	531.39	0.8800+04
60	0.1000+08	0.3000+00	0.1660+03	682.23	545.12	0.8870+04
61	0.1000+08	0.3000+00	0.2590+03	689.42	558.28	0.8940+04
62	0.1000+08	0.3000+00	0.3920+03	696.31	570.88	0.9010+04

DIAMETER 1.598 CM
 LENGTH 2000.000 CM
 QADS 55000. CAL/MUL
 QSADS 20000. CAL/MUL
 DECAY 0.0 1/S
 ELEMENT MASS 137.
 PENETRATION 0.0

BEISPIEL: ZUNAECHST WIRD DER STATIONAERE ANFANGSZUSTAND
 BERECHNET. DAZU WERDEN DER STROMUNGSSINN (4400.00) UND DER
 SYSTEMDRUCK EINGELESEN.

NEW 1ST VALUE 4400.000 FROM UNIT 15
 NEW VALUE FOR PGAS 40.000 FROM UNIT 15

JETZT WIRD DER SP-FLUSS AUS DEM CORE HERAUS EINGELESEN. DIE
 ERFORDERLICHEN OPTIONEN WERDEN VOM PROGRAMM AUTOMATISCH GE-
 SETZT. DER SP-FLUSS BETRAEGT 0.25D15 ATGME/SEC. IN DER LISTE
 ERSCHEINT SOFORT DIE SP-KONZENTRATION IM KUEHLGAS.

++++ WARNING: NO-UPDATE REQUESTS ISSUED

NEW VALUE FOR NO 0.6690+07 FROM UNIT 15

DER ANFANGSZEITPUNKT (150SEC.) WIRD NUN GESPEICHERT. NACH DEM DER
 ANFANGSZUSTAND BERECHNET IST, WIRD ER ZURUECKGERUFEN.

TIME STORED: 150.0000 SEC

DER ANFANGSZUSTAND WIRD MIT EINER SCHRITTWEITE VON 108 SEC.
 IN 3 DURCHLAEFEN FESTGELEGT. JEDER DIESER DURCHLAEFEN WIRD
 AUSGEDRUCKT.

DELTA T = *****

MAXIMUM NUMBER OF CYCLES 3

CYCLE # 1 OF 3 CYCLES STARTED

0.1150+08	0.5720+00	0.2720-03	291.7	165.6	3223.9
0.1140+08	0.5550+00	0.2800-03	297.0	172.8	3253.4
0.1130+08	0.5350+00	0.2900-03	303.5	181.9	3290.5
0.1110+08	0.5150+00	0.3010-03	310.0	190.8	3326.9
0.1100+08	0.4960+00	0.3120-03	316.3	199.6	3362.6
0.1090+08	0.4770+00	0.3240-03	322.5	208.2	3397.5
0.1080+08	0.4620+00	0.3340-03	327.2	214.7	3424.3
0.1070+08	0.4440+00	0.3470-03	333.2	223.0	3458.0
0.1060+08	0.4270+00	0.3610-03	339.0	231.0	3490.6
0.1050+08	0.4090+00	0.3750-03	344.7	239.0	3523.2
0.1040+08	0.3920+00	0.3910-03	350.3	246.7	3554.9
0.1030+08	0.3800+00	0.4040-03	354.7	252.7	3579.3
0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9
0.9140+07	0.2000+00	0.7290-03	437.9	338.6	4049.2
0.9070+07	0.1990+00	0.7280-03	443.3	339.0	4080.0
0.8990+07	0.1980+00	0.7270-03	449.0	339.6	4112.2
0.8920+07	0.1970+00	0.7260-03	455.0	340.1	4146.1

0.886D+07	0.196D+00	0.725D-03	459.9	340.5	4173.9
0.878D+07	0.194D+00	0.724D-03	466.5	341.1	4211.0
0.870D+07	0.193D+00	0.723D-03	473.4	341.7	4249.9
0.862D+07	0.191D+00	0.722D-03	480.6	342.3	4290.7
0.853D+07	0.190D+00	0.721D-03	488.2	342.9	4333.5
0.844D+07	0.188D+00	0.720D-03	496.1	343.6	4378.3
0.837D+07	0.187D+00	0.719D-03	502.7	344.1	4415.5
0.828D+07	0.185D+00	0.718D-03	511.4	344.9	4464.7
0.818D+07	0.183D+00	0.717D-03	520.5	345.6	4516.3
0.808D+07	0.182D+00	0.716D-03	530.1	346.4	4570.5
0.798D+07	0.180D+00	0.715D-03	540.2	347.2	4627.2
0.790D+07	0.178D+00	0.715D-03	548.5	347.9	4674.1
0.780D+07	0.176D+00	0.714D-03	559.5	348.8	4736.4
0.769D+07	0.174D+00	0.714D-03	571.1	349.7	4801.7
0.758D+07	0.160D+00	0.767D-03	583.0	356.7	4869.1
0.748D+07	0.125D+00	0.987D-03	594.8	376.2	4935.9
0.738D+07	0.771D-01	0.161D-02	605.8	405.4	4998.1
0.732D+07	0.559D-01	0.222D-02	614.0	420.4	5044.5
0.723D+07	0.343D-01	0.363D-02	624.1	438.9	5101.7
0.715D+07	0.192D-01	0.649D-02	633.8	456.6	5156.5
0.708D+07	0.100D-01	0.125D-01	643.1	473.6	5209.0
0.701D+07	0.504D-02	0.248D-01	652.0	489.9	5259.3
0.696D+07	0.296D-02	0.423D-01	658.7	502.1	5296.9
0.690D+07	0.153D-02	0.818D-01	666.9	517.1	5343.2
0.685D+07	0.823D-03	0.152D+00	674.7	531.4	5387.5
0.679D+07	0.460D-03	0.273D+00	682.2	545.1	5430.0
0.674D+07	0.267D-03	0.470D+00	689.4	558.3	5470.6
0.669D+07	0.161D-03	0.780D+00	696.3	570.9	5509.6

IDMR 3 = 10000150.0000SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

CYCLE # 2 OF 3 CYCLES STARTED

0.115D+08	0.572D+00	0.272D-03	291.7	165.6	3223.9
0.114D+08	0.555D+00	0.280D-03	297.0	172.8	3253.4
0.113D+08	0.535D+00	0.290D-03	303.5	181.9	3290.5
0.111D+08	0.515D+00	0.301D-03	310.0	190.8	3326.9
0.110D+08	0.496D+00	0.312D-03	316.3	199.6	3362.6
0.109D+08	0.477D+00	0.324D-03	322.5	208.2	3397.5
0.108D+08	0.462D+00	0.334D-03	327.2	214.7	3424.3
0.107D+08	0.444D+00	0.347D-03	333.2	223.0	3458.0
0.106D+08	0.427D+00	0.361D-03	339.0	231.0	3490.9
0.105D+08	0.409D+00	0.375D-03	344.7	239.0	3523.2
0.104D+08	0.392D+00	0.391D-03	350.3	246.7	3554.9
0.103D+08	0.380D+00	0.404D-03	354.7	252.7	3579.3
0.103D+08	0.363D+00	0.421D-03	360.1	260.1	3609.8
0.102D+08	0.348D+00	0.439D-03	365.3	267.5	3639.6
0.101D+08	0.332D+00	0.459D-03	370.5	274.6	3668.9
0.100D+08	0.318D+00	0.480D-03	375.6	281.7	3697.6
0.993D+07	0.303D+00	0.502D-03	380.6	288.6	3725.8
0.988D+07	0.292D+00	0.520D-03	384.4	293.9	3747.4
0.981D+07	0.278D+00	0.545D-03	389.2	300.5	3774.5
0.974D+07	0.265D+00	0.572D-03	393.9	307.0	3801.0
0.967D+07	0.252D+00	0.601D-03	398.5	313.4	3827.0
0.961D+07	0.239D+00	0.632D-03	403.0	319.6	3852.5
0.956D+07	0.229D+00	0.658D-03	406.5	324.4	3872.1
0.950D+07	0.217D+00	0.694D-03	410.9	330.4	3896.7
0.944D+07	0.209D+00	0.721D-03	415.1	334.8	3920.9
0.938D+07	0.204D+00	0.733D-03	419.5	336.9	3945.5
0.932D+07	0.203D+00	0.732D-03	424.0	337.3	3971.0
0.925D+07	0.202D+00	0.731D-03	428.7	337.8	3997.7
0.920D+07	0.201D+00	0.730D-03	432.7	338.1	4019.9
0.914D+07	0.200D+00	0.729D-03	437.9	338.6	4049.2
0.907D+07	0.199D+00	0.728D-03	443.3	339.0	4080.0
0.899D+07	0.198D+00	0.727D-03	449.0	339.6	4112.2
0.892D+07	0.197D+00	0.726D-03	455.0	340.1	4146.1
0.886D+07	0.196D+00	0.725D-03	459.9	340.5	4173.9
0.878D+07	0.194D+00	0.724D-03	466.5	341.1	4211.0
0.870D+07	0.193D+00	0.723D-03	473.4	341.7	4249.9
0.862D+07	0.191D+00	0.722D-03	480.6	342.3	4290.7
0.853D+07	0.190D+00	0.721D-03	488.2	342.9	4333.5
0.844D+07	0.188D+00	0.720D-03	496.1	343.6	4378.3
0.837D+07	0.187D+00	0.719D-03	502.7	344.1	4415.5

107A JOLICH ZAM

0.8280+07	0.1850+00	0.7180-03	511.4	344.9	4464.7
0.8180+07	0.1830+00	0.7170-03	520.5	345.6	4516.3
0.8080+07	0.1820+00	0.7160-03	530.1	346.4	4570.5
0.7980+07	0.1800+00	0.7150-03	540.2	347.2	4627.2
0.7900+07	0.1780+00	0.7150-03	548.5	347.9	4674.1
0.7800+07	0.1760+00	0.7140-03	559.5	348.8	4736.4
0.7690+07	0.1740+00	0.7140-03	571.1	349.7	4801.7
0.7580+07	0.1600+00	0.7670-03	583.0	356.7	4869.1
0.7480+07	0.1250+00	0.9870-03	594.8	376.2	4935.9
0.7380+07	0.7710-01	0.1610-02	605.8	405.4	4998.1
0.7320+07	0.5590-01	0.2220-02	614.0	420.4	5044.5
0.7230+07	0.3430-01	0.3630-02	624.1	438.9	5101.7
0.7150+07	0.1920-01	0.6490-02	633.8	456.6	5156.5
0.7080+07	0.1000-01	0.1250-01	643.1	473.6	5209.0
0.7010+07	0.5040-02	0.2480-01	652.0	489.9	5259.3
0.6960+07	0.2960-02	0.4230-01	658.7	502.1	5296.9
0.6900+07	0.1530-02	0.8180-01	666.9	517.1	5343.2
0.6850+07	0.8230-03	0.1520+00	674.7	531.4	5387.5
0.6790+07	0.4600-03	0.2730+00	682.2	545.1	5430.0
0.6740+07	0.2670-03	0.4700+00	689.4	558.3	5470.6
0.6690+07	0.1610-03	0.7800+00	696.3	570.9	5509.6

IDNR 4 = 20000150.0000SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

CYCLE # 3 OF 3 CYCLES STARTED

0.1150+08	0.5720+00	0.2720-03	291.7	165.6	3223.9
0.1140+08	0.5550+00	0.2800-03	297.0	172.8	3253.4
0.1130+08	0.5350+00	0.2900-03	303.5	181.9	3290.5
0.1110+08	0.5150+00	0.3010-03	310.0	190.8	3326.9
0.1100+08	0.4960+00	0.3120-03	316.3	199.6	3362.6
0.1090+08	0.4770+00	0.3240-03	322.5	208.2	3397.5
0.1080+08	0.4620+00	0.3340-03	327.2	214.7	3424.3
0.1070+08	0.4440+00	0.3470-03	333.2	223.0	3458.0
0.1060+08	0.4270+00	0.3610-03	339.0	231.0	3490.9
0.1050+08	0.4090+00	0.3750-03	344.7	239.0	3523.2
0.1040+08	0.3920+00	0.3910-03	350.3	246.7	3554.9
0.1030+08	0.3800+00	0.4040-03	354.7	252.7	3579.3
0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9
0.9140+07	0.2000+00	0.7290-03	437.9	338.6	4049.2
0.9070+07	0.1990+00	0.7280-03	443.3	339.0	4080.0
0.8990+07	0.1980+00	0.7270-03	449.0	339.6	4112.2
0.8920+07	0.1970+00	0.7260-03	455.0	340.1	4146.1
0.8860+07	0.1960+00	0.7250-03	459.9	340.5	4173.9
0.8780+07	0.1940+00	0.7240-03	466.5	341.1	4211.0
0.8700+07	0.1930+00	0.7230-03	473.4	341.7	4249.9
0.8620+07	0.1910+00	0.7220-03	480.6	342.3	4290.7
0.8530+07	0.1900+00	0.7210-03	488.2	342.9	4333.5
0.8440+07	0.1880+00	0.7200-03	496.1	343.6	4378.3
0.8370+07	0.1870+00	0.7190-03	502.7	344.1	4415.5
0.8280+07	0.1850+00	0.7180-03	511.4	344.9	4464.7
0.8180+07	0.1830+00	0.7170-03	520.5	345.6	4516.3
0.8080+07	0.1820+00	0.7160-03	530.1	346.4	4570.5
0.7980+07	0.1800+00	0.7150-03	540.2	347.2	4627.2
0.7900+07	0.1780+00	0.7150-03	548.5	347.9	4674.1
0.7800+07	0.1760+00	0.7140-03	559.5	348.8	4736.4
0.7690+07	0.1740+00	0.7140-03	571.1	349.7	4801.7

0.7580+07	0.1600+00	0.7670-03	583.0	356.7	4869.1
0.7480+07	0.1250+00	0.9870-03	594.8	376.2	4935.9
0.7380+07	0.7710-01	0.1610-02	605.8	405.4	4998.1
0.7320+07	0.5590-01	0.2220-02	614.0	420.4	5044.5
0.7230+07	0.3430-01	0.3630-02	624.1	438.9	5101.7
0.7150+07	0.1920-01	0.6490-02	633.8	456.6	5156.5
0.7080+07	0.1000-01	0.1250-01	643.1	473.6	5209.0
0.7010+07	0.5040-02	0.2480-01	652.0	489.9	5259.3
0.6960+07	0.2960-02	0.4230-01	658.7	502.1	5296.9
0.6900+07	0.1530-02	0.8180-01	666.9	517.1	5343.2
0.6850+07	0.8230-03	0.1520+00	674.7	531.4	5387.5
0.6790+07	0.4600-03	0.2730+00	682.2	545.1	5430.0
0.6740+07	0.2670-03	0.4700+00	689.4	556.3	5470.6
0.6690+07	0.1610-03	0.7800+00	696.3	570.9	5509.6

IDWR 5 = 300000150.0000SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

DIE ANFANGSZEIT WIRD ZURUECKGERUFEN, D.H. DIE INSTATIONAERE
RECHNUNG BEGINNT MIT DEM ZUERST EINGELESENEN ZEITPUNKT (150SEC.).

IDWR 6 :ACTUAL TIME SUCCESSFULLY RESTORED TO 150.0000 SEC
ZUM TEST DER STABILITAET WERDEN JETZT 100 SCHRITTE MIT 0.001
SEC GERECHNET. NACH JE 25 SCHRITTEN ERFOLGT EIN AUSDRUCK.

DELTA T = 0.001

MAXIMUM NUMBER OF CYCLES 100

CYCLE #	1 OF	100 CYCLES STARTED			
0.1150+08	0.5720+00	0.2720-03	291.7	165.6	3223.9
0.1140+08	0.5550+00	0.2800-03	297.0	172.8	3253.4
0.1130+08	0.5350+00	0.2900-03	303.5	181.9	3290.5
0.1110+08	0.5150+00	0.3010-03	310.0	190.8	3326.9
0.1100+08	0.4960+00	0.3120-03	316.3	199.6	3362.6
0.1090+08	0.4770+00	0.3240-03	322.5	208.2	3397.5
0.1080+08	0.4620+00	0.3340-03	327.2	214.7	3424.3
0.1070+08	0.4440+00	0.3470-03	333.2	223.0	3458.0
0.1060+08	0.4270+00	0.3610-03	339.0	231.0	3490.9
0.1050+08	0.4090+00	0.3750-03	344.7	239.0	3523.2
0.1040+08	0.3920+00	0.3910-03	350.3	246.7	3554.9
0.1030+08	0.3800+00	0.4040-03	354.7	252.7	3579.3
0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9
0.9140+07	0.2000+00	0.7290-03	437.9	338.6	4049.2
0.9070+07	0.1990+00	0.7280-03	443.3	339.0	4080.0
0.8990+07	0.1980+00	0.7270-03	449.0	339.6	4112.2
0.8920+07	0.1970+00	0.7260-03	455.0	340.1	4146.1
0.8860+07	0.1960+00	0.7250-03	459.9	340.5	4173.9
0.8780+07	0.1940+00	0.7240-03	466.5	341.1	4211.0
0.8700+07	0.1930+00	0.7230-03	473.4	341.7	4249.9
0.8620+07	0.1910+00	0.7220-03	480.6	342.3	4290.7
0.8530+07	0.1900+00	0.7210-03	488.2	342.9	4333.5
0.8440+07	0.1880+00	0.7200-03	496.1	343.6	4378.3
0.8370+07	0.1870+00	0.7190-03	502.7	344.1	4415.5
0.8280+07	0.1850+00	0.7180-03	511.4	344.9	4464.7
0.8180+07	0.1830+00	0.7170-03	520.5	345.6	4516.3
0.8080+07	0.1820+00	0.7160-03	530.1	346.4	4570.5
0.7980+07	0.1800+00	0.7150-03	540.2	347.2	4627.2
0.7900+07	0.1780+00	0.7150-03	548.5	347.9	4674.1

KFA JULICH ZAM

0.7800+07	0.1760+00	0.7140-03	559.5	348.8	4736.4
0.7690+07	0.1740+00	0.7140-03	571.1	349.7	4801.7
0.7580+07	0.1600+00	0.7670-03	583.0	356.7	4869.1
0.7480+07	0.1250+00	0.9870-03	594.8	376.2	4935.9
0.7380+07	0.7710-01	0.1610-02	605.8	405.4	4998.1
0.7320+07	0.5590-01	0.2220-02	614.0	420.4	5044.5
0.7230+07	0.3430-01	0.3630-02	624.1	438.9	5101.7
0.7150+07	0.1420-01	0.6490-02	633.8	456.6	5156.5
0.7080+07	0.1000-01	0.1250-01	643.1	473.6	5209.0
0.7010+07	0.5040-02	0.2480-01	652.0	489.9	5259.3
0.6960+07	0.2960-02	0.4230-01	658.7	502.1	5296.9
0.6900+07	0.1530-02	0.8180-01	666.9	517.1	5343.2
0.6850+07	0.8230-03	0.1520+00	674.7	531.4	5387.5
0.6790+07	0.4600-03	0.2730+00	682.2	545.1	5430.0
0.6740+07	0.2670-03	0.4700+00	689.4	558.3	5470.6
0.6690+07	0.1610-03	0.7800+00	696.3	570.9	5509.6
IDWR	7 =	150.0010SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
THERE ARE 0.11330+22 ATOMS ADSORBED					
THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.24900+15 ATOMS/SEC					
IDWR	8 =	150.0020SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	9 =	150.0030SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	10 =	150.0040SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	11 =	150.0050SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	12 =	150.0060SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	13 =	150.0070SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	14 =	150.0080SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	15 =	150.0090SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	16 =	150.0100SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	17 =	150.0110SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	18 =	150.0120SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	19 =	150.0130SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	20 =	150.0140SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	21 =	150.0150SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	22 =	150.0160SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	23 =	150.0170SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	24 =	150.0180SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	25 =	150.0190SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	26 =	150.0200SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	27 =	150.0210SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	28 =	150.0220SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	29 =	150.0230SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
IDWR	30 =	150.0240SEC	SUCCESSFULLY	PROCESSED	
CYCLE #	25 OF	100 CYCLES	STARTED		
0.1150+08	0.5720+00	0.2720-03	291.7	165.6	3223.9
0.1140+08	0.5550+00	0.2800-03	297.0	172.8	3253.4
0.1130+08	0.5350+00	0.2900-03	303.5	181.9	3290.5
0.1110+08	0.5150+00	0.3010-03	310.0	190.8	3326.9
0.1100+08	0.4960+00	0.3120-03	316.3	199.6	3362.6
0.1090+08	0.4770+00	0.3240-03	322.5	208.2	3397.5
0.1080+08	0.4620+00	0.3340-03	327.2	214.7	3424.3
0.1070+08	0.4440+00	0.3470-03	333.2	223.0	3458.0
0.1060+08	0.4270+00	0.3610-03	339.0	231.0	3490.9
0.1050+08	0.4090+00	0.3750-03	344.7	239.0	3523.2
0.1040+08	0.3920+00	0.3910-03	350.3	246.7	3554.9
0.1030+08	0.3800+00	0.4040-03	354.7	252.7	3579.3
0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9

0.914D+07	0.200D+00	0.729D-03	437.9	338.6	4049.2
0.907D+07	0.199D+00	0.728D-03	443.3	339.0	4080.0
0.899D+07	0.198D+00	0.727D-03	449.0	339.6	4112.2
0.892D+07	0.197D+00	0.726D-03	455.0	340.1	4146.1
0.886D+07	0.196D+00	0.725D-03	459.9	340.5	4173.9
0.878D+07	0.194D+00	0.724D-03	466.5	341.1	4211.0
0.870D+07	0.193D+00	0.723D-03	473.4	341.7	4249.9
0.862D+07	0.191D+00	0.722D-03	480.6	342.3	4290.7
0.853D+07	0.190D+00	0.721D-03	488.2	342.9	4333.5
0.844D+07	0.188D+00	0.720D-03	496.1	343.6	4378.3
0.837D+07	0.187D+00	0.719D-03	502.7	344.1	4415.5
0.828D+07	0.185D+00	0.718D-03	511.4	344.9	4464.7
0.818D+07	0.183D+00	0.717D-03	520.5	345.6	4516.3
0.808D+07	0.182D+00	0.716D-03	530.1	346.4	4570.5
0.798D+07	0.180D+00	0.715D-03	540.2	347.2	4627.2
0.790D+07	0.178D+00	0.715D-03	548.5	347.9	4674.1
0.780D+07	0.176D+00	0.714D-03	559.5	348.8	4736.4
0.769D+07	0.174D+00	0.714D-03	571.1	349.7	4801.7
0.758D+07	0.160D+00	0.767D-03	583.0	356.7	4869.1
0.748D+07	0.125D+00	0.987D-03	594.8	376.2	4935.9
0.738D+07	0.771D-01	0.161D-02	605.8	405.4	4998.1
0.732D+07	0.559D-01	0.222D-02	614.0	420.4	5044.5
0.723D+07	0.343D-01	0.363D-02	624.1	438.9	5101.7
0.715D+07	0.192D-01	0.649D-02	633.8	456.6	5156.5
0.708D+07	0.100D-01	0.125D-01	643.1	473.6	5209.0
0.701D+07	0.504D-02	0.248D-01	652.0	489.9	5259.3
0.696D+07	0.296D-02	0.423D-01	658.7	502.1	5296.9
0.690D+07	0.153D-02	0.818D-01	666.9	517.1	5343.2
0.685D+07	0.823D-03	0.152D+00	674.7	531.4	5387.5
0.679D+07	0.460D-03	0.273D+00	682.2	545.1	5430.0
0.674D+07	0.267D-03	0.470D+00	689.4	558.3	5470.6
0.669D+07	0.161D-03	0.780D+00	696.3	570.9	5509.6

IDWR 31 = 150.0250SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

IDWR 32 = 150.0260SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 33 = 150.0270SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 34 = 150.0280SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 35 = 150.0290SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 36 = 150.0300SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 37 = 150.0310SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 38 = 150.0320SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 39 = 150.0330SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 40 = 150.0340SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 41 = 150.0350SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 42 = 150.0360SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 43 = 150.0370SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 44 = 150.0380SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 45 = 150.0390SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 46 = 150.0400SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 47 = 150.0410SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 48 = 150.0420SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 49 = 150.0430SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 50 = 150.0440SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 51 = 150.0450SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 52 = 150.0460SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 53 = 150.0470SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 54 = 150.0480SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 55 = 150.0490SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

CYCLE # 50 OF 100 CYCLES STARTED

0.115D+08	0.572D+00	0.272D-03	291.7	165.6	3223.9
0.114D+08	0.555D+00	0.280D-03	297.0	172.8	3253.4
0.113D+08	0.535D+00	0.290D-03	303.5	181.9	3290.5
0.111D+08	0.515D+00	0.301D-03	310.0	190.8	3326.9
0.110D+08	0.496D+00	0.312D-03	316.3	199.6	3362.6
0.109D+08	0.477D+00	0.324D-03	322.5	208.2	3397.5
0.108D+08	0.462D+00	0.334D-03	327.2	214.7	3424.3
0.107D+08	0.444D+00	0.347D-03	333.2	223.0	3458.0
0.106D+08	0.427D+00	0.361D-03	339.0	231.0	3490.9
0.105D+08	0.409D+00	0.375D-03	344.7	239.0	3523.2
0.104D+08	0.392D+00	0.391D-03	350.3	246.7	3554.9
0.103D+08	0.380D+00	0.404D-03	354.7	252.7	3579.3

KYA JULICH ZAM

0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9
0.9140+07	0.2000+00	0.7290-03	437.9	338.6	4049.2
0.9070+07	0.1990+00	0.7280-03	443.3	339.0	4080.0
0.8990+07	0.1980+00	0.7270-03	449.0	339.6	4112.2
0.8920+07	0.1970+00	0.7260-03	455.0	340.1	4146.1
0.8860+07	0.1960+00	0.7250-03	459.9	340.5	4173.9
0.8780+07	0.1940+00	0.7240-03	466.5	341.1	4211.0
0.8700+07	0.1930+00	0.7230-03	473.4	341.7	4249.9
0.8620+07	0.1910+00	0.7220-03	480.6	342.3	4290.7
0.8530+07	0.1900+00	0.7210-03	488.2	342.9	4333.5
0.8440+07	0.1880+00	0.7200-03	496.1	343.6	4378.3
0.8370+07	0.1870+00	0.7190-03	502.7	344.1	4415.5
0.8280+07	0.1850+00	0.7180-03	511.4	344.9	4464.7
0.8180+07	0.1830+00	0.7170-03	520.5	345.6	4516.3
0.8080+07	0.1820+00	0.7160-03	530.1	346.4	4570.5
0.7980+07	0.1800+00	0.7150-03	540.2	347.2	4627.2
0.7900+07	0.1780+00	0.7150-03	548.5	347.9	4674.1
0.7800+07	0.1760+00	0.7140-03	559.5	348.8	4736.4
0.7690+07	0.1740+00	0.7140-03	571.1	349.7	4801.7
0.7580+07	0.1600+00	0.7670-03	583.0	356.7	4869.1
0.7480+07	0.1250+00	0.9870-03	594.8	376.2	4935.5
0.7380+07	0.7710-01	0.1610-02	605.8	405.4	4998.1
0.7320+07	0.5590-01	0.2220-02	614.0	420.4	5044.5
0.7230+07	0.3430-01	0.3630-02	624.1	438.9	5101.7
0.7150+07	0.1920-01	0.6490-02	633.8	456.6	5156.5
0.7080+07	0.1000-01	0.1250-01	643.1	473.6	5209.0
0.7010+07	0.5040-02	0.2480-01	652.0	489.9	5259.3
0.6960+07	0.2960-02	0.4230-01	658.7	502.1	5296.9
0.6900+07	0.1530-02	0.8180-01	666.9	517.1	5343.2
0.6850+07	0.8230-03	0.1520+00	674.7	531.4	5387.5
0.6790+07	0.4600-03	0.2730+00	682.2	545.1	5430.0
0.6740+07	0.2670-03	0.4700+00	689.4	558.3	5470.6
0.6690+07	0.1610-03	0.7800+00	696.3	570.9	5509.6

IDNR 56 = 150.0500SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 THERE ARE 0.11330+22 ATOMS ADSORBED
 THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.24900+15 ATOMS/SEC

IDNR 57 = 150.0510SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 58 = 150.0520SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 59 = 150.0530SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 60 = 150.0540SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 61 = 150.0550SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 62 = 150.0560SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 63 = 150.0570SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 64 = 150.0580SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 65 = 150.0590SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 66 = 150.0600SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 67 = 150.0610SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 68 = 150.0620SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 69 = 150.0630SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 70 = 150.0640SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 71 = 150.0650SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 72 = 150.0660SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 73 = 150.0670SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 74 = 150.0680SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 75 = 150.0690SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDNR 76 = 150.0700SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 77 = 150.0710SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 78 = 150.0720SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 79 = 150.0730SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 80 = 150.0740SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

CYCLE #	75 OF	100 CYCLES STARTED			
0.115D+08	0.572D+00	0.272D-03	291.7	165.6	3223.5
0.114D+08	0.555D+00	0.280D-03	297.0	172.8	3253.4
0.113D+08	0.535D+00	0.290D-03	303.5	181.9	3290.5
0.111D+08	0.515D+00	0.301D-03	310.0	190.8	3326.5
0.110D+08	0.496D+00	0.312D-03	316.3	199.6	3362.6
0.109D+08	0.477D+00	0.324D-03	322.5	208.2	3397.5
0.108D+08	0.462D+00	0.334D-03	327.2	214.7	3424.3
0.107D+08	0.444D+00	0.347D-03	333.2	223.0	3458.0
0.106D+08	0.427D+00	0.361D-03	339.0	231.0	3490.5
0.105D+08	0.409D+00	0.375D-03	344.7	239.0	3523.2
0.104D+08	0.392D+00	0.391D-03	350.3	246.7	3554.9
0.103D+08	0.380D+00	0.404D-03	354.7	252.7	3579.3
0.103D+08	0.363D+00	0.421D-03	360.1	260.1	3609.8
0.102D+08	0.348D+00	0.439D-03	365.3	267.5	3639.6
0.101D+08	0.332D+00	0.459D-03	370.5	274.6	3668.9
0.100D+08	0.318D+00	0.480D-03	375.6	281.7	3697.6
0.993D+07	0.303D+00	0.502D-03	380.6	288.6	3725.8
0.988D+07	0.292D+00	0.520D-03	384.4	293.9	3747.4
0.981D+07	0.278D+00	0.545D-03	389.2	300.5	3774.5
0.974D+07	0.265D+00	0.572D-03	393.9	307.0	3801.0
0.967D+07	0.252D+00	0.601D-03	398.5	313.4	3827.0
0.961D+07	0.239D+00	0.632D-03	403.0	319.6	3852.5
0.956D+07	0.229D+00	0.658D-03	406.5	324.4	3872.1
0.950D+07	0.217D+00	0.694D-03	410.9	330.4	3896.7
0.944D+07	0.209D+00	0.721D-03	415.1	334.8	3920.9
0.938D+07	0.204D+00	0.733D-03	419.5	336.9	3945.5
0.932D+07	0.203D+00	0.732D-03	424.0	337.3	3971.0
0.925D+07	0.202D+00	0.731D-03	428.7	337.8	3997.7
0.920D+07	0.201D+00	0.730D-03	432.7	338.1	4019.9
0.914D+07	0.200D+00	0.729D-03	437.9	338.6	4049.2
0.907D+07	0.199D+00	0.728D-03	443.3	339.0	4080.0
0.899D+07	0.198D+00	0.727D-03	449.0	339.6	4112.2
0.892D+07	0.197D+00	0.726D-03	455.0	340.1	4146.1
0.886D+07	0.196D+00	0.725D-03	459.9	340.5	4173.9
0.878D+07	0.194D+00	0.724D-03	466.5	341.1	4211.0
0.870D+07	0.193D+00	0.723D-03	473.4	341.7	4249.9
0.862D+07	0.191D+00	0.722D-03	480.6	342.3	4290.7
0.853D+07	0.190D+00	0.721D-03	488.2	342.9	4333.5
0.844D+07	0.188D+00	0.720D-03	496.1	343.6	4378.3
0.837D+07	0.187D+00	0.719D-03	502.7	344.1	4415.5
0.828D+07	0.185D+00	0.718D-03	511.4	344.9	4464.7
0.818D+07	0.183D+00	0.717D-03	520.5	345.6	4516.3
0.808D+07	0.182D+00	0.716D-03	530.1	346.4	4570.5
0.798D+07	0.180D+00	0.715D-03	540.2	347.2	4627.2
0.790D+07	0.178D+00	0.715D-03	548.5	347.9	4674.1
0.780D+07	0.176D+00	0.714D-03	559.5	348.8	4736.4
0.769D+07	0.174D+00	0.714D-03	571.1	349.7	4801.7
0.758D+07	0.160D+00	0.767D-03	583.0	356.7	4869.1
0.748D+07	0.125D+00	0.987D-03	594.8	376.2	4935.9
0.738D+07	0.771D-01	0.161D-02	605.8	405.4	4998.1
0.732D+07	0.559D-01	0.222D-02	614.0	420.4	5044.5
0.723D+07	0.343D-01	0.363D-02	624.1	438.9	5101.7
0.715D+07	0.192D-01	0.649D-02	633.8	456.6	5156.5
0.708D+07	0.100D-01	0.125D-01	643.1	473.6	5209.0
0.701D+07	0.504D-02	0.248D-01	652.0	489.9	5259.3
0.696D+07	0.296D-02	0.423D-01	658.7	502.1	5296.9
0.690D+07	0.153D-02	0.818D-01	666.9	517.1	5343.2
0.685D+07	0.823D-03	0.152D+00	674.7	531.4	5387.5
0.679D+07	0.460D-03	0.273D+00	682.2	545.1	5430.0
0.674D+07	0.267D-03	0.470D+00	689.4	558.3	5470.6
0.669D+07	0.161D-03	0.780D+00	696.3	570.9	5509.6

IDWR 81 = 150.0750SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED
 THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

10A JULICH IDWR 82 = 150.0760SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 83 = 150.0770SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 84 = 150.0780SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

IDWR 85 = 150.0790SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 86 = 150.0800SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 87 = 150.0810SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 88 = 150.0820SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 89 = 150.0830SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 90 = 150.0840SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 91 = 150.0850SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 92 = 150.0860SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 93 = 150.0870SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 94 = 150.0880SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 95 = 150.0890SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 96 = 150.0900SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 97 = 150.0910SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 98 = 150.0920SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 99 = 150.0930SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 100 = 150.0940SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 3 = 150.0950SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 4 = 150.0960SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 5 = 150.0970SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 6 = 150.0980SEC SUCCESSFULLY PROCESSED
 IDWR 7 = 150.0990SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

CYCLE #	100 OF	100 CYCLES STARTED			
0.1150+08	0.5720+00	0.2720-03	291.7	165.6	3223.9
0.1140+08	0.5550+00	0.2800-03	297.0	172.8	3253.4
0.1130+08	0.5350+00	0.2900-03	303.5	181.9	3290.5
0.1110+08	0.5150+00	0.3010-03	310.0	190.8	3326.9
0.1100+08	0.4960+00	0.3120-03	316.3	199.6	3362.6
0.1090+08	0.4770+00	0.3240-03	322.5	208.2	3397.5
0.1080+08	0.4620+00	0.3340-03	327.2	214.7	3424.3
0.1070+08	0.4440+00	0.3470-03	333.2	223.0	3458.0
0.1060+08	0.4270+00	0.3610-03	339.0	231.0	3490.9
0.1050+08	0.4090+00	0.3750-03	344.7	239.0	3523.2
0.1040+08	0.3920+00	0.3910-03	350.3	246.7	3554.9
0.1030+08	0.3800+00	0.4040-03	354.7	252.7	3579.3
0.1030+08	0.3630+00	0.4210-03	360.1	260.1	3609.8
0.1020+08	0.3480+00	0.4390-03	365.3	267.5	3639.6
0.1010+08	0.3320+00	0.4590-03	370.5	274.6	3668.9
0.1000+08	0.3180+00	0.4800-03	375.6	281.7	3697.6
0.9930+07	0.3030+00	0.5020-03	380.6	288.6	3725.8
0.9880+07	0.2920+00	0.5200-03	384.4	293.9	3747.4
0.9810+07	0.2780+00	0.5450-03	389.2	300.5	3774.5
0.9740+07	0.2650+00	0.5720-03	393.9	307.0	3801.0
0.9670+07	0.2520+00	0.6010-03	398.5	313.4	3827.0
0.9610+07	0.2390+00	0.6320-03	403.0	319.6	3852.5
0.9560+07	0.2290+00	0.6580-03	406.5	324.4	3872.1
0.9500+07	0.2170+00	0.6940-03	410.9	330.4	3896.7
0.9440+07	0.2090+00	0.7210-03	415.1	334.8	3920.9
0.9380+07	0.2040+00	0.7330-03	419.5	336.9	3945.5
0.9320+07	0.2030+00	0.7320-03	424.0	337.3	3971.0
0.9250+07	0.2020+00	0.7310-03	428.7	337.8	3997.7
0.9200+07	0.2010+00	0.7300-03	432.7	338.1	4019.9
0.9140+07	0.2000+00	0.7290-03	437.9	338.6	4049.2
0.9070+07	0.1990+00	0.7280-03	443.3	339.0	4080.0
0.8990+07	0.1980+00	0.7270-03	449.0	339.6	4112.2
0.8920+07	0.1970+00	0.7260-03	455.0	340.1	4146.1
0.8860+07	0.1960+00	0.7250-03	459.9	340.5	4173.9
0.8780+07	0.1940+00	0.7240-03	466.5	341.1	4211.0
0.8700+07	0.1930+00	0.7230-03	473.4	341.7	4249.9
0.8620+07	0.1910+00	0.7220-03	480.6	342.3	4290.7
0.8530+07	0.1900+00	0.7210-03	488.2	342.9	4333.5
0.8440+07	0.1880+00	0.7200-03	496.1	343.6	4378.3
0.8370+07	0.1870+00	0.7190-03	502.7	344.1	4415.5
0.8280+07	0.1850+00	0.7180-03	511.4	344.9	4464.7
0.8180+07	0.1830+00	0.7170-03	520.5	345.6	4516.3
0.8080+07	0.1820+00	0.7160-03	530.1	346.4	4570.5
0.7980+07	0.1800+00	0.7150-03	540.2	347.2	4627.2
0.7900+07	0.1780+00	0.7150-03	548.5	347.9	4674.1
0.7800+07	0.1760+00	0.7140-03	559.5	348.8	4736.4
0.7690+07	0.1740+00	0.7140-03	571.1	349.7	4801.7
0.7580+07	0.1600+00	0.7670-03	583.0	356.7	4869.1
0.7480+07	0.1250+00	0.9870-03	594.8	376.2	4935.9
0.7380+07	0.7710-01	0.1610-02	605.8	405.4	4998.1

0.7320+07	0.5590-01	0.2220-02	614.0	420.4	5044.5
0.7230+07	0.3430-01	0.3630-02	624.1	438.9	5101.7
0.7150+07	0.1920-01	0.6490-02	633.8	456.6	5156.5
0.7080+07	0.1000-01	0.1250-01	643.1	473.6	5209.0
0.7010+07	0.5040-02	0.2480-01	652.0	489.9	5259.3
0.6960+07	0.2960-02	0.4230-01	653.7	502.1	5296.5
0.6900+07	0.1530-02	0.8180-01	666.9	517.1	5343.2
0.6850+07	0.8230-03	0.1520+00	674.7	531.4	5387.5
0.6790+07	0.4600-03	0.2730+00	682.2	545.1	5430.0
0.6740+07	0.2670-03	0.4700+00	689.4	558.3	5470.6
0.6690+07	0.1610-03	0.7800+00	696.3	570.9	5509.6

IDWR 8 = 150.1000SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2490D+15 ATOMS/SEC

JETZT WIRD DIE ZEIT AUF 2 STD. VORGESTELLT.

IDWR 9 :ACTUAL TIME SUCCESSFULLY SET TO 7200.0000 SEC

UM JETZT DIE ZUR ZEIT 7200 SEC. GUELFIGE TEMPERATUR ZU LESEN.

WIRD NUN DIE OPTION TUPDAT GESETZT UND EIN ZEITSCHRITT GE-
RECHNET.

OPTION REQUESTED: STUPDATS

OPTION REQUESTED: SENDOPTS

DELTA T = 0.000

MAXIMUM NUMBER OF CYCLES 1

CYCLE #	1 OF	1 CYCLES STARTED	7000.000	7200.000	7500.000
TADAP: TIMEL,TTOT,TIMEH (IN SEC.):					
0.1150+08	0.5720+00	0.3350-03	310.9	167.8	3332.4
0.1140+08	0.5550+00	0.3760-03	316.9	176.1	3366.2
0.1130+08	0.5350+00	0.4350-03	324.4	186.5	3408.6
0.1110+08	0.5150+00	0.4990-03	331.8	196.7	3450.1
0.1100+08	0.4960+00	0.5690-03	339.0	206.6	3490.9
0.1090+08	0.4770+00	0.6460-03	346.1	216.4	3530.8
0.1080+08	0.4620+00	0.7110-03	351.5	223.9	3561.4
0.1070+08	0.4440+00	0.8000-03	358.3	233.3	3599.8
0.1060+08	0.4270+00	0.8960-03	365.0	242.6	3637.5
0.1050+08	0.4090+00	0.1000-02	371.5	251.6	3674.4
0.1040+08	0.3920+00	0.1110-02	377.9	260.4	3710.5
0.1040+08	0.3800+00	0.1210-02	382.8	267.3	3738.3
0.1030+08	0.3630+00	0.1340-02	389.0	275.8	3773.1
0.1020+08	0.3480+00	0.1480-02	395.0	284.1	3807.2
0.1010+08	0.3320+00	0.1630-02	400.9	292.3	3840.6
0.1000+08	0.3180+00	0.1790-02	406.7	300.3	3873.4
0.9960+07	0.3030+00	0.1970-02	412.4	308.2	3905.5
0.9900+07	0.2920+00	0.2120-02	416.8	314.2	3930.1
0.9830+07	0.2780+00	0.2320-02	422.2	321.7	3961.0
0.9760+07	0.2650+00	0.2530-02	427.6	329.1	3991.3
0.9700+07	0.2520+00	0.2580-02	432.9	336.3	4021.1
0.9620+07	0.2390+00	0.2220-02	438.1	338.6	4050.9
0.9570+07	0.2290+00	0.1730-02	442.4	339.0	4075.1
0.9500+07	0.2170+00	0.1270-02	448.2	339.5	4107.5
0.9440+07	0.2090+00	0.1020-02	454.2	340.1	4141.4
0.9380+07	0.2040+00	0.9360-03	460.5	340.6	4177.0
0.9320+07	0.2030+00	0.9430-03	467.1	341.2	4214.3
0.9260+07	0.2020+00	0.9520-03	474.0	341.8	4253.5
0.9210+07	0.2010+00	0.9600-03	479.8	342.3	4285.9
0.9140+07	0.2000+00	0.9700-03	487.4	342.9	4328.9
0.9070+07	0.1990+00	0.9800-03	495.3	343.6	4374.0
0.9000+07	0.1980+00	0.9920-03	503.7	344.3	4421.3
0.8920+07	0.1970+00	0.1000-02	512.5	345.0	4470.9
0.8860+07	0.1960+00	0.1010-02	519.7	345.6	4511.8
0.8790+07	0.1940+00	0.1030-02	529.4	346.4	4566.3
0.8710+07	0.1930+00	0.1040-02	539.5	347.3	4623.4
0.8620+07	0.1910+00	0.1060-02	550.1	348.1	4683.4
0.8540+07	0.1900+00	0.1070-02	561.2	349.1	4746.3
0.8450+07	0.1880+00	0.1090-02	572.9	350.0	4812.2
0.8380+07	0.1870+00	0.1100-02	582.6	350.8	4867.0
0.8290+07	0.1850+00	0.1300-02	595.3	354.1	4938.7
0.8220+07	0.1830+00	0.3200-02	608.1	369.5	5010.8
0.8290+07	0.1820+00	0.1550-01	620.4	397.6	5080.4
0.8840+07	0.1800+00	0.6610-01	631.8	425.6	5145.1
0.9840+07	0.1780+00	0.1480+00	640.3	442.5	5193.1
0.1270+08	0.1760+00	0.3760+00	650.7	463.1	5251.7

KFA AUCH ZAM

0.188D+08	0.174D+00	0.867D+00	660.5	482.6	5307.3
0.242D+08	0.160D+00	0.143D+01	669.9	501.2	5360.1
0.195D+08	0.125D+00	0.135D+01	678.7	518.8	5410.3
0.126D+08	0.771D-01	0.953D+00	687.2	535.6	5457.9
0.113D+08	0.559D-01	0.100D+01	693.4	547.9	5493.0
0.100D+08	0.343D-01	0.117D+01	701.0	563.1	5536.1
0.914D+07	0.192D-01	0.150D+01	708.3	577.5	5577.1
0.852D+07	0.100D-01	0.209D+01	715.1	591.1	5615.9
0.806D+07	0.504D-02	0.307D+01	721.7	604.1	5652.8
0.780D+07	0.296D-02	0.418D+01	726.5	613.7	5680.2
0.753D+07	0.153D-02	0.618D+01	732.4	625.5	5713.6
0.733D+07	0.823D-03	0.897D+01	738.0	636.6	5745.3
0.718D+07	0.460D-03	0.128D+02	743.4	647.2	5775.4
0.705D+07	0.267D-03	0.178D+02	748.4	657.2	5804.1
0.694D+07	0.161D-03	0.242D+02	753.2	666.8	5831.2

IDWR 10 = 7200.0001SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2574D+15 ATOMS/SEC

JETZT WIRD DER PRINTLEVEL AUF 5 UNGESETZT, EIN DURCHLAUF
MIT DIESEM LEVEL GERECHNET UND DER PRINTLEVEL ZURUECKGESETZT.
(NUR ZUR DEMONSTRATION)

◊ PRINTLEVEL CHANGED TO 5

RUNSIM 0

DELTA T = 0.001

MAXIMUM NUMBER OF CYCLES 1

RUNP>>>> S.R. ENTERED

1 CYCLE # 1 OF 1 CYCLES STARTED

TADAP: TIMEL,TTOT,TIMEH (IN SEC.): 7000.000

7200.001

7500.000

500.0000000000000000

200.001099999998587

.400002199999997171

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

33.28

33.32

33.39

310.17

310.95

312.12

167.74

167.83

167.96

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

33.78

33.83

33.90

319.08

319.91

321.14

180.08

180.23

180.45

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

34.27

34.32

34.40

327.78

328.65

329.96

192.11

192.33

192.64

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

34.75

34.81

34.88

336.28

337.19

338.56

203.86

204.13

204.54

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

35.22

35.28

35.36

344.57

345.52

346.95

215.33

215.66

216.15

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

35.68

35.74

35.82

352.66

353.65

355.14

226.52

226.91

227.48

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

36.13

36.18

36.27

360.55

361.59

363.14

237.44

237.88

238.54

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

36.56

36.62

36.71

368.26

369.33

370.94

248.10

248.60

249.34

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

36.99

37.05

37.14

375.78

376.89

378.56

258.51

259.05

259.87

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

37.40

37.47

37.56

383.12

384.27

385.99

268.66

269.26

270.15

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

37.81

37.87

37.97

390.29

391.47

393.25

278.58

279.22

280.19

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

38.20

38.27

38.37

397.28

398.50

400.33

288.25

288.94

289.98

VGE,TEG,TEW;L,A,H:

38.59

38.66

38.76

404.11

405.36

407.24

297.69

298.43

299.54

KFA JUCH ZAM VGE,TEG,TEW;L,A,H:

38.96

39.03

39.14

410.77

412.06

413.98

306.90

307.68

308.86

VGE,TEG,TEW;L,A,H:	39.33	39.40	39.52
417.28	418.59	420.57	
315.88	316.71	317.96	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	39.69	39.76	39.88
423.62	424.97	427.00	
324.65	325.52	326.82	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	40.04	40.12	40.23
429.82	431.20	433.28	
333.17	334.08	335.44	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	40.38	40.46	40.59
435.92	437.36	439.52	
338.40	338.54	338.75	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	40.74	40.83	40.96
442.28	443.80	446.09	
339.02	339.16	339.36	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	41.12	41.21	41.35
449.02	450.63	453.06	
339.62	339.76	339.98	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	41.53	41.62	41.77
456.16	457.87	460.45	
340.24	340.40	340.62	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	41.95	42.06	42.21
463.72	465.54	468.27	
340.90	341.06	341.30	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	42.41	42.51	42.68
471.73	473.66	476.56	
341.59	341.76	342.01	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	42.89	43.00	43.17
480.23	482.27	485.34	
342.32	342.50	342.76	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	43.39	43.52	43.70
489.23	491.40	494.65	
343.09	343.27	343.55	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	43.93	44.06	44.26
498.76	501.07	504.52	
343.89	344.09	344.38	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	44.50	44.64	44.85
508.87	511.31	514.97	
344.74	344.95	345.26	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	45.11	45.26	45.47
519.58	522.17	526.06	
345.63	345.85	346.18	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	45.75	45.91	46.14
530.94	533.68	537.80	
346.57	346.80	347.14	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	46.43	46.60	46.84
542.97	545.88	550.25	
347.56	347.80	348.16	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	47.15	47.33	47.59
555.72	558.81	563.45	
348.60	348.86	349.24	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	47.91	48.10	48.38
569.24	572.52	577.44	
349.70	349.97	350.37	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	48.72	48.92	49.22
583.57	587.05	592.26	
350.86	351.14	351.57	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	49.58	49.78	50.07
598.76	602.19	607.34	
352.08	356.55	363.25	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	50.44	50.62	50.87
614.01	617.04	621.59	
379.63	389.28	403.74	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	51.22	51.38	51.63
627.69	630.60	634.98	
418.41	423.21	430.42	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	51.94	52.10	52.34
640.55	643.35	647.55	
443.89	448.52	455.47	
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	52.63	52.78	53.01
652.63	655.32	659.35	
467.84	472.30	478.99	

VGE,TEG,TEW;L,A,H:	53.27	53.41	53.63	
663.98	666.56	670.43		
490.34	494.63	501.08		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	53.87	54.01	54.22	
674.65	677.12	680.84		
511.48	515.62	521.81		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	54.44	54.57	54.77	
684.67	687.04	690.61		
531.35	535.33	541.25		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	54.97	55.10	55.29	
694.09	696.37	699.78		
550.02	553.84	559.57		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	55.47	55.59	55.78	
702.94	705.12	708.39		
567.57	571.24	576.74		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	55.94	56.06	56.24	
711.26	713.35	716.48		
584.05	587.58	592.86		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	56.38	56.49	56.66	
719.07	721.07	724.08		
599.54	602.92	606.00		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	56.80	56.91	57.07	
726.41	728.33	731.21		
614.09	617.34	622.22		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	57.19	57.29	57.45	
733.31	735.15	737.91		
627.77	630.89	635.56		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	57.55	57.65	57.80	
739.80	741.56	744.20		
640.62	643.61	648.10		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	57.90	57.99	58.14	
745.89	747.57	750.10		
652.70	655.57	659.86		
VGE,TEG,TEW;L,A,H:	58.22	58.31	58.45	
751.62	753.23	755.64		
664.05	666.79	670.91		
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	3	1	1.82	2
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	4	2	2.63	3
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	5	3	3.45	4
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	6	4	4.27	5
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	7	5	5.08	6
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	8	5	5.90	6
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	9	6	6.72	7
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	10	7	7.53	8
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	11	8	8.35	9
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	12	9	9.17	10
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	13	9	9.98	10
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	14	10	10.80	11
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	15	11	11.62	12
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	16	12	12.43	13
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	17	13	13.25	14
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	18	14	14.07	15
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	19	14	14.88	15
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	20	15	15.70	16
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	21	16	16.52	17
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	22	17	17.33	18
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	23	18	18.15	19
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	24	18	18.97	19
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	25	19	19.78	20
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	26	20	20.60	21
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	27	21	21.42	22
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	28	22	22.23	23
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	29	23	23.05	24
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	30	23	23.87	24
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	31	24	24.68	25
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	32	25	25.50	26
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	33	26	26.32	27
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	34	27	27.13	28
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	35	27	27.95	28
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	36	28	28.77	29
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	37	29	29.58	30
TADAP:I, ILADR,RLADR,IHADR	38	30	30.40	31

TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	39	31	31.22	32
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	40	32	32.03	33
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	41	32	32.85	33
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	42	33	33.67	34
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	43	34	34.48	35
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	44	35	35.30	36
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	45	36	36.12	37
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	46	36	36.93	37
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	47	37	37.75	38
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	48	38	38.57	39
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	49	39	39.38	40
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	50	40	40.20	41
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	51	41	41.02	42
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	52	41	41.83	42
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	53	42	42.65	43
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	54	43	43.47	44
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	55	44	44.28	45
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	56	45	45.10	46
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	57	45	45.92	46
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	58	46	46.73	47
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	59	47	47.55	48
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	60	48	48.37	49
TADAP:I, ILADR, RLADR, IHADR	61	49	49.18	50

VFUNC>>>> S.R. ENTERED

H:	0.0	8.88	8.96	9.07	9.18	9.29	9.39	9.47	9.57	9.67
H:	9.77	9.87	9.94	10.04	10.13	10.22	10.31	10.40	10.46	10.55
H:	10.63	10.72	10.84	10.95	11.10	11.25	11.42	11.59	11.78	11.93
H:	12.14	12.35	12.58	12.82	13.02	13.28	13.57	13.86	14.18	14.51
H:	14.79	15.13	15.35	15.42	15.47	15.55	15.65	15.75	15.85	15.94
H:	16.03	16.10	16.18	16.26	16.33	16.41	16.46	16.53	16.59	16.66
H:	16.71	16.77	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
H:	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
H:	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
H:	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

RUNP-I, AC, BC, HILFC:	2	0.561D-02	0.4910+09	0.1020-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	3	0.541D-02	0.4920+09	0.1020-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	4	0.552D-02	0.4930+09	0.103D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	5	0.563D-02	0.4940+09	0.103D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	6	0.573D-02	0.495D+09	0.103D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	7	0.609D-02	0.496D+09	0.103D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	8	0.592D-02	0.497D+09	0.103D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	9	0.602D-02	0.498D+09	0.104D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	10	0.611D-02	0.499D+09	0.104D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	11	0.621D-02	0.500D+09	0.104D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	12	0.654D-02	0.501D+09	0.104D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	13	0.638D-02	0.502D+09	0.105D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	14	0.647D-02	0.503D+09	0.105D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	15	0.656D-02	0.505D+09	0.105D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	16	0.665D-02	0.506D+09	0.105D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	17	0.673D-02	0.507D+09	0.106D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	18	0.703D-02	0.508D+09	0.106D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	19	0.689D-02	0.509D+09	0.106D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	20	0.697D-02	0.510D+09	0.106D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	21	0.705D-02	0.511D+09	0.107D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	22	0.712D-02	0.513D+09	0.107D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	23	0.737D-02	0.515D+09	0.107D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	24	0.720D-02	0.519D+09	0.108D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	25	0.727D-02	0.523D+09	0.109D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	26	0.733D-02	0.529D+09	0.110D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	27	0.741D-02	0.535D+09	0.112D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	28	0.748D-02	0.543D+09	0.113D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	29	0.782D-02	0.552D+09	0.115D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	30	0.762D-02	0.559D+09	0.116D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	31	0.770D-02	0.568D+09	0.118D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	32	0.780D-02	0.578D+09	0.120D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	33	0.790D-02	0.588D+09	0.123D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	34	0.834D-02	0.599D+09	0.125D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	35	0.808D-02	0.608D+09	0.127D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	36	0.819D-02	0.621D+09	0.129D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	37	0.832D-02	0.633D+09	0.132D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	38	0.845D-02	0.647D+09	0.135D-02
RUNP-I, AC, BC, HILFC:	39	0.859D-02	0.661D+09	0.138D-02

17A JULICH

```
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 40 0.918D-02 0.677D+09 0.141D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 41 0.888D-02 0.689D+09 0.144D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 42 0.912D-02 0.705D+09 0.147D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 43 0.936D-02 0.714D+09 0.149D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 44 0.956D-02 0.717D+09 0.149D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 45 0.101D-01 0.719D+09 0.150D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 46 0.984D-02 0.722D+09 0.150D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 47 0.100D-01 0.726D+09 0.151D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 48 0.102D-01 0.730D+09 0.152D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 49 0.103D-01 0.731D+09 0.152D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 50 0.105D-01 0.724D+09 0.151D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 51 0.109D-01 0.712D+09 0.148D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 52 0.107D-01 0.707D+09 0.147D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 53 0.108D-01 0.702D+09 0.146D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 54 0.110D-01 0.697D+09 0.145D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 55 0.111D-01 0.692D+09 0.144D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 56 0.114D-01 0.688D+09 0.143D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 57 0.113D-01 0.684D+09 0.143D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 58 0.114D-01 0.681D+09 0.142D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 59 0.115D-01 0.677D+09 0.141D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 60 0.116D-01 0.674D+09 0.140D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 61 0.117D-01 0.671D+09 0.140D-02
RUNP-I.AC,BC,HILFC: 62 0.125D-01 0.668D+09 0.139D-02
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 62 0.449D-01 0.100D+01 0.901D+07
1 .160934521090074991E-03 24.1767700326482320
2 .160934521087810079E-03 24.1767700326472870
3 .160934521087810079E-03 24.1767700326472870
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1448D-03 0.2417D+02 0.1609D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1770D-03 0.2418D+02 -0.1609D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1609D-03 0.2418D+02 0.1016D-19
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 62 0.161D-03 0.242D+02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1609D-03 0.2418D+02 0.2388D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 62 1 0.901D+07 0.161D-03 0.242D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1609D-03 0.2418D+02 0.2389D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 62 2 0.901D+07 0.161D-03 0.242D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 62 0.1609D-03 0.2418D+02 0.2390D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 61 0.331D-01 0.100D+01 0.995D+07
1 .267016460152276328E-03 17.7587862960224498
2 .267016460149553951E-03 17.7587862960215652
3 .267016460149553951E-03 17.7587862960215652
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2403D-03 0.1775D+02 0.2670D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2937D-03 0.1777D+02 -0.2670D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2670D-03 0.1776D+02 0.5421D-19
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 61 0.267D-03 0.178D+02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2670D-03 0.1776D+02 0.2873D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 61 1 0.995D+07 0.267D-03 0.178D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2670D-03 0.1776D+02 0.2879D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 61 2 0.995D+07 0.267D-03 0.178D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 61 0.2670D-03 0.1776D+02 0.2879D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 60 0.239D-01 0.100D+01 0.108D+08
1 .459689816399430965E-03 12.7650077420661603
2 .459689816396206656E-03 12.7650077420653432
3 .459689816396206656E-03 12.7650077420653432
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.4137D-03 0.1275D+02 0.4597D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.5057D-03 0.1278D+02 -0.4597D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.4597D-03 0.1277D+02 0.5421D-19
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 60 0.460D-03 0.128D+02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.4597D-03 0.1277D+02 0.3388D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 60 1 0.108D+08 0.460D-03 0.128D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.4597D-03 0.1277D+02 0.3388D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 60 2 0.108D+08 0.460D-03 0.128D+02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 60 0.4597D-03 0.1277D+02 0.3388D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 59 0.169D-01 0.100D+01 0.120D+08
1 .822874472220525130E-03 8.97415134661733127
2 .822874472216835373E-03 8.97415134661669511
3 .822874472216835373E-03 8.97415134661669511
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.7406D-03 0.8960D+01 0.8229D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.9052D-03 0.8988D+01 -0.8229D-04
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.8229D-03 0.8974D+01 0.5421D-19
KPA JOLUCH ZAI STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 59 0.823D-03 0.897D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.8229D-03 0.8974D+01 0.3881D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 59 1 0.120D+08 0.823D-03 0.897D+01 1
```

```
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.8229D-03 0.8974D+01 0.3898D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 59 2 0.120D+08 0.823D-03 0.897D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 59 0.8229D-03 0.8974D+01 0.3909D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 58 0.117D-01 0.100D+01 0.136D+08
1 .153231584174125859E-02 6.17734900952713462
2 .153231584173736934E-02 6.17734900952667365
3 .153231584173736934E-02 6.17734900952667365
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1379D-02 0.6159D+01 0.1532D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1686D-02 0.6196D+01 -0.1532D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1532D-02 0.6177D+01 0.5421D-19
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 58 0.153D-02 0.618D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1532D-02 0.6177D+01 0.4071D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 58 1 0.136D+08 0.153D-02 0.618D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1532D-02 0.6177D+01 0.4087D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 58 2 0.136D+08 0.153D-02 0.618D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 58 0.1532D-02 0.6177D+01 0.4104D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 57 0.796D-02 0.100D+01 0.157D+08
1 .295770667348118052E-02 4.18343637312399519
2 .295770667347794548E-02 4.18343637312372785
3 .295770667347794548E-02 4.18343637312372785
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.2662D-02 0.4159D+01 0.2958D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.3253D-02 0.4208D+01 -0.2958D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.2958D-02 0.4183D+01 0.1626D-18
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 57 0.296D-02 0.418D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.2958D-02 0.4183D+01 0.3388D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 57 1 0.157D+08 0.296D-02 0.418D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.2958D-02 0.4183D+01 0.3404D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 57 2 0.157D+08 0.296D-02 0.418D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 57 0.2958D-02 0.4183D+01 0.3415D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 56 0.587D-02 0.100D+01 0.181D+08
1 .503777718274124944E-02 3.07203544937650341
2 .503777718273999871E-02 3.07203544937642703
3 .503777718273999871E-02 3.07203544937642703
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.4534D-02 0.3041D+01 0.5038D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.5542D-02 0.3103D+01 -0.5038D-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.5038D-02 0.3072D+01 0.8674D-18
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 56 0.504D-02 0.307D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.5038D-02 0.3072D+01 0.1475D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 56 1 0.181D+08 0.504D-02 0.307D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.5038D-02 0.3072D+01 0.1475D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 56 2 0.181D+08 0.504D-02 0.307D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 56 0.5038D-02 0.3072D+01 0.1475D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 55 0.403D-02 0.100D+01 0.221D+08
1 .100137294663849054E-01 2.09372117677395C98
2 .100137294663906464E-01 2.09372117677419656
3 .100137294663906464E-01 2.09372117677419656
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.9012D-02 0.2052D+01 0.1001D-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.1102D-01 0.2137D+01 -0.1001D-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.1001D-01 0.2094D+01 0.8674D-18
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 55 0.100D-01 0.209D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.1001D-01 0.2094D+01 -0.5638D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 55 1 0.221D+08 0.100D-01 0.209D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.1001D-01 0.2094D+01 -0.5378D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 55 2 0.221D+08 0.100D-01 0.209D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 55 0.1001D-01 0.2094D+01 -0.5204D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 54 0.290D-02 0.100D+01 0.279D+08
1 .192352014717366397E-01 1.49888250827222014
2 .192352014717606283E-01 1.49888250827296021
3 .192352014717606283E-01 1.49888250827296021
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.1731D-01 0.1441D+01 0.1924D-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.2116D-01 0.1559D+01 -0.1924D-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.1924D-01 0.1499D+01 0.8674D-18
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 54 0.192D-01 0.150D+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.1924D-01 0.1499D+01 -0.2437D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 54 1 0.279D+08 0.192D-01 0.150D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.1924D-01 0.1499D+01 -0.2420D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 54 2 0.279D+08 0.192D-01 0.150D+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 54 0.1924D-01 0.1499D+01 -0.2394D-15
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I): 53 0.228D-02 0.100D+01 0.363D+08
1 .343366780285954349E-01 1.16663013960160167
2 .343366780286633129E-01 1.16663013960325967
3 .343366780286633129E-01 1.16663013960325967
```

```

ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.30900-01 0.10860+01 0.34340-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.37770-01 0.12540+01 -0.34340-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.34340-01 0.11670+01 0.26020-17
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 53 0.3430-01 0.1170+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.34340-01 0.11670+01 -0.69220-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 53 1 0.3630+08 0.3430-01 0.1170+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.34340-01 0.11670+01 -0.68960-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 53 2 0.3630+08 0.3430-01 0.1170+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 53 0.34340-01 0.11670+01 -0.68780-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 52 0.1970-02 0.1000+01 0.4840+03
1 .559470576412936377E-01 1.00285769714125794
2 .559470576414628452E-01 1.00285769714487416
3 .559470576414628452E-01 1.00285769714487416
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.50350-01 0.89010+00 0.55950-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.61540-01 0.11300+01 -0.55950-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.55950-01 0.10030+01 0.86740-18
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 52 0.5590-01 0.1000+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.55950-01 0.10030+01 -0.17260-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 52 1 0.4840+08 0.5590-01 0.1000+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.55950-01 0.10030+01 -0.17230-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 52 2 0.4840+08 0.5590-01 0.1000+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 52 0.55950-01 0.10030+01 -0.17220-14
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 51 0.1890-02 0.1000+01 0.6200+08
1 .770895695488661159E-01 .953035901222950496
2 .770895695491986277E-01 .953035901229810203
3 .770895695491986138E-01 .953035901229810203
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.69380-01 0.80660+00 0.77090-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.84800-01 0.11260+01 -0.77090-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.77090-01 0.95300+00 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 51 0.7710-01 0.9530+00 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.77090-01 0.95300+00 -0.33720-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 51 1 0.6200+08 0.7710-01 0.9530+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.77090-01 0.95300+00 -0.33720-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 51 2 0.6200+08 0.7710-01 0.9530+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 51 0.77090-01 0.95300+00 -0.33720-14
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 50 0.2720-02 0.1000+01 0.1290+09
1 .124750267045265411 1.35046425315785235
2 .124750267047489205 1.35046425322410535
3 .124750267047489177 1.35046425322410535
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.11230+00 0.10250+01 0.12480-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.13720+00 0.17790+01 -0.12480-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.12480+00 0.13500+01 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 50 0.1250+00 0.1350+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.12480+00 0.13500+01 -0.22480-13
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 50 1 0.1290+09 0.1250+00 0.1350+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.12480+00 0.13500+01 -0.22480-13
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 50 2 0.1290+09 0.1250+00 0.1350+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 50 0.12480+00 0.13500+01 -0.22480-13
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 49 0.2900-02 0.1000+01 0.1810+09
1 .160342837436265928 1.42515670415949147
2 .160342837440658914 1.42515670430100716
3 .160342837440658859 1.42515670430100716
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.14430+00 0.99190+00 0.16030-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.17640+00 0.20480+01 -0.16030-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.16030+00 0.14250+01 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 49 0.1600+00 0.1430+01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.16030+00 0.14250+01 -0.44280-13
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 49 1 0.1810+09 0.1600+00 0.1430+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.16030+00 0.14250+01 -0.44260-13
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 49 2 0.1810+09 0.1600+00 0.1430+01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 49 0.16030+00 0.14250+01 -0.44210-13
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 48 0.1760-02 0.1000+01 0.1350+09
1 .173756866212937455 .866679041322587579
2 .173756866214776720 .866679041359505548
3 .173756866214776706 .866679041359505548
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.15640+00 0.57960+00 0.17380-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.19110+00 0.12960+01 -0.17380-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.17380+00 0.86670+00 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 48 0.1740+00 0.8670+00 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.17380+00 0.86670+00 -0.18430-13
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 48 1 0.1350+09 0.1740+00 0.8670+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.17380+00 0.86670+00 -0.18390-13

```

```
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 48 2 0.135D+09 0.174D+00 0.867D+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 48 0.1738D+00 0.8667D+00 -0.1836D-13
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 47 0.760D-03 0.100D+01 0.704D+08
1 .175930930452998693 .376324214150748002
2 .175930930453276055 .376324214153229405
3 .175930930453276055 .376324214153229405
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1583D+00 0.2477D+00 0.1759D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1935D+00 0.5718D+00 -0.1759D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1759D+00 0.3763D+00 0.4163D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 47 0.176D+00 0.376D+00 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1759D+00 0.3763D+00 -0.2706D-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 47 1 0.704D+08 0.176D+00 0.376D+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1759D+00 0.3763D+00 -0.2665D-14
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 47 2 0.704D+08 0.176D+00 0.376D+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 47 0.1759D+00 0.3763D+00 -0.2637D-14
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 46 0.298D-03 0.100D+01 0.343D+08
1 .178020463882184107 .148245610907349890
2 .178020463882190685 .148245610907373593
3 .178020463882190685 .148245610907373593
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1602D+00 0.9592D-01 0.1780D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1958D+00 0.2291D+00 -0.1780D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1780D+00 0.1482D+00 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 46 0.178D+00 0.148D+00 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1780D+00 0.1482D+00 -0.2776D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 46 1 0.343D+08 0.178D+00 0.148D+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1780D+00 0.1482D+00 0.1388D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 46 2 0.343D+08 0.178D+00 0.148D+00 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 46 0.1780D+00 0.1482D+00 0.4163D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 45 0.132D-03 0.100D+01 0.195D+08
1 .179602245076786737 .660989973962130689E-01
2 .179602245076771305 .660989973961874783E-01
3 .179602245076771305 .660989973961874783E-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1616D+00 0.4215D-01 0.1796D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1976D+00 0.1037D+00 -0.1796D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1796D+00 0.6610D-01 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 45 0.180D+00 0.661D-01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1796D+00 0.6610D-01 0.2082D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 45 1 0.195D+08 0.180D+00 0.661D-01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1796D+00 0.6610D-01 0.2498D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 45 2 0.195D+08 0.180D+00 0.661D-01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 45 0.1796D+00 0.6610D-01 0.2776D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 44 0.310D-04 0.100D+01 0.114D+08
1 .181534823857035954 .155367263380149874E-01
2 .181534823857023506 .155367263380099645E-01
3 .181534823857023506 .155367263380099645E-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1634D+00 0.9674D-02 0.1815D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1997D+00 0.2495D-01 -0.1815D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1815D+00 0.1554D-01 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 44 0.182D+00 0.155D-01 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1815D+00 0.1554D-01 0.1665D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 44 1 0.114D+08 0.182D+00 0.155D-01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1815D+00 0.1554D-01 0.2082D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 44 2 0.114D+08 0.182D+00 0.155D-01 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 44 0.1815D+00 0.1554D-01 0.2359D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 43 0.635D-05 0.100D+01 0.894D+07
1 .183392813292562559 .319998604161414463E-02
2 .183392813292560297 .319998604161393998E-02
3 .183392813292560297 .319998604161393998E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.1651D+00 0.1942D-02 0.1834D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.2017D+00 0.5273D-02 -0.1834D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.1834D+00 0.3200D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 43 0.183D+00 0.320D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.1834D+00 0.3200D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 43 1 0.894D+07 0.183D+00 0.320D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.1834D+00 0.3200D-02 0.1249D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 43 2 0.894D+07 0.183D+00 0.320D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 43 0.1834D+00 0.3200D-02 0.1527D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 42 0.254D-05 0.100D+01 0.845D+07
1 .185178758181900022 .129872828121438785E-02
2 .185178758181899647 .129872828121437391E-02
3 .185178758181899647 .129872828121437391E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 42 0.1667D+00 0.7746D-03 0.1852D-01
```

```
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 42 0.2037D+00 0.2177D-02 -0.1852D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 42 0.1852D+00 0.1299D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 42 0.185D+00 0.130D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 42 0.1852D+00 0.1299D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 42 1 0.845D+07 0.185D+00 0.130D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 42 0.1852D+00 0.1299D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 42 2 0.845D+07 0.185D+00 0.130D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 42 0.1852D+00 0.1299D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(1): 41 0.212D-05 0.100D+01 0.845D+07
1 .186895183144808005 .110466173878545C68E-02
2 .186895183144807978 .110466173878545068E-02
3 .186895183144807978 .110466173878545068E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.1882D+00 0.6539D-03 0.1869D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.2056D+00 0.1866D-02 -0.1869D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.1869D+00 0.1105D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 41 0.187D+00 0.110D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.1869D+00 0.1105D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 41 1 0.845D+07 0.187D+00 0.110D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.1869D+00 0.1105D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 41 2 0.845D+07 0.187D+00 0.110D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 41 0.1869D+00 0.1105D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(1): 40 0.205D-05 0.100D+01 0.850D+07
1 .188200103926060069 .10899800910115051E-02
2 .188200103926060042 .10899800910115051E-02
3 .188200103926060042 .10899800910115051E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.1694D+00 0.6424D-03 0.1882D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.2070D+00 0.1849D-02 -0.1882D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.1882D+00 0.1090D-02 0.4163D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 40 0.188D+00 0.109D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.1882D+00 0.1090D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 40 1 0.850D+07 0.188D+00 0.109D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.1882D+00 0.1090D-02 0.1110D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 40 2 0.850D+07 0.188D+00 0.109D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 40 0.1882D+00 0.1090D-02 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(1): 39 0.197D-05 0.100D+01 0.858D+07
1 .189787564392040697 .107263234179910222E-02
2 .189787564392040670 .107263234179910222E-02
3 .189787564392040670 .107263234179910222E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.1708D+00 0.6289D-03 0.1898D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.2088D+00 0.1829D-02 -0.1898D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.1898D+00 0.1073D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 39 0.190D+00 0.107D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.1898D+00 0.1073D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 39 1 0.858D+07 0.190D+00 0.107D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.1898D+00 0.1073D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 39 2 0.858D+07 0.190D+00 0.107D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 39 0.1898D+00 0.1073D-02 0.8327D-16
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(1): 38 0.190D-05 0.100D+01 0.867D+07
1 .191313430925641598 .105638053467716798E-02
2 .191313430925641570 .105638053467716798E-02
3 .191313430925641570 .105638053467716798E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.1722D+00 0.6162D-03 0.1913D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.2104D+00 0.1811D-02 -0.1913D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.1913D+00 0.1056D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 38 0.191D+00 0.106D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.1913D+00 0.1056D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 38 1 0.867D+07 0.191D+00 0.106D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.1913D+00 0.1056D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 38 2 0.867D+07 0.191D+00 0.106D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 38 0.1913D+00 0.1056D-02 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPRT,AN(1): 37 0.183D-05 0.100D+01 0.875D+07
1 .192780196144998611 .104114952188367517E-02
2 .192780196144598597 .104114952188367517E-02
3 .192780196144998597 .104114952188367517E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.1735D+00 0.6044D-03 0.1928D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.2121D+00 0.1794D-02 -0.1928D-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.1928D+00 0.1041D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 37 0.193D+00 0.104D-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.1928D+00 0.1041D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 37 1 0.875D+07 0.193D+00 0.104D-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.1928D+00 0.1041D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 37 2 0.875D+07 0.193D+00 0.104D-02 1
```

KFA XJUCH ZAB

```
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 37 0.19280+00 0.10410-02 0.13880-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 36 0.1770-05 0.1000+01 0.8830+07
1 .194189983610317918 .102686606205614655E-02
2 .194189983610317890 .102686606205614655E-02
3 .194189983610317890 .102686606205614655E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.17480+00 0.59330-03 0.19420-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.21360+00 0.17770-02 -0.19420-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.19420+00 0.10270-02 0.41630-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 36 0.1940+00 0.1030-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.19420+00 0.10270-02 0.69390-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 36 1 0.8830+07 0.1940+00 0.1030-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.19420+00 0.10270-02 0.11100-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 36 2 0.8830+07 0.1940+00 0.1030-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 36 0.19420+00 0.10270-02 0.13880-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 35 0.1710-05 0.1000+01 0.8900+07
1 .195544737481858577 .101345317475705062E-02
2 .195544737481858563 .101345317475705062E-02
3 .195544737481858563 .101345317475705062E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.17600+00 0.58290-03 0.19550-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.21510+00 0.17620-02 -0.19550-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.19550+00 0.10130-02 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 35 0.1960+00 0.1010-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.19550+00 0.10130-02 0.41630-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 35 1 0.8900+07 0.1960+00 0.1010-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.19550+00 0.10130-02 0.83270-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 35 2 0.8900+07 0.1960+00 0.1010-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 35 0.19550+00 0.10130-02 0.11100-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 34 0.1670-05 0.1000+01 0.8960+07
1 .196569598043817961 .100347285421706806E-02
2 .196569598043817934 .100347285421706806E-02
3 .196569598043817934 .100347285421706806E-02
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.17690+00 0.57520-03 0.19660-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.21620+00 0.17510-02 -0.19660-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.19660+00 0.10030-02 0.27760-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 34 0.1970+00 0.1000-02 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.19660+00 0.10030-02 0.55510-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 34 1 0.8960+07 0.1970+00 0.1000-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.19660+00 0.10030-02 0.97140-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 34 2 0.8960+07 0.1970+00 0.1000-02 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 34 0.19660+00 0.10030-02 0.12490-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 33 0.1620-05 0.1000+01 0.9030+07
1 .197822776116430565 .991528280190153018E-03
2 .197822776116430551 .991528280190153018E-03
3 .197822776116430551 .991528280190153018E-03
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.17800+00 0.56590-03 0.19780-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.21760+00 0.17370-02 -0.19780-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.19780+00 0.99150-03 0.27760-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 33 0.1980+00 0.9920-03 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.19780+00 0.99150-03 0.55510-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 33 1 0.9030+07 0.1980+00 0.9920-03 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.19780+00 0.99150-03 0.97140-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 33 2 0.9030+07 0.1980+00 0.9920-03 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 33 0.19780+00 0.99150-03 0.13880-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 32 0.1580-05 0.1000+01 0.9100+07
1 .199027373297993457 .980262341223785204E-03
2 .199027373297993443 .980262341223785204E-03
3 .199027373297993443 .980262341223785204E-03
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.17910+00 0.55720-03 0.19900-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.21890+00 0.17240-02 -0.19900-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.19900+00 0.98030-03 0.13880-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 32 0.1990+00 0.9800-03 3
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.19900+00 0.98030-03 0.55510-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 32 1 0.9100+07 0.1990+00 0.9800-03 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.19900+00 0.98030-03 0.83270-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 32 2 0.9100+07 0.1990+00 0.9800-03 1
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 32 0.19900+00 0.98030-03 0.12490-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(1): 31 0.1530-05 0.1000+01 0.9170+07
1 .200185112173454985 .969628718485652640E-03
2 .200185112173454957 .969628718485652640E-03
3 .200185112173454957 .969628718485652640E-03
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 31 0.18020+00 0.54900-03 0.20020-01
ZREAL>>>:1,SIGI,THETA(1),FTH: 31 0.22020+00 0.17120-02 -0.20020-01
```

```
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 31 0.2002D+00 0.9696D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 31 0.200D+00 0.970D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 31 0.2002D+00 0.9696D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 31 1 0.917D+07 0.200D+00 0.970D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 31 0.2002D+00 0.9696D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 31 2 0.917D+07 0.200D+00 0.970D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 31 0.2002D+00 0.9696D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 30 0.145D-05 0.100D+01 0.923D+07
1 .201297579272777459 .95958451245429526E-03
2 .201297579272777485 .959584512454295286E-03
3 .201297579272777485 .959584512454295286E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.1812D+00 0.5413D-03 0.2013D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.2214D+00 0.1701D-02 -0.2013D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.2013D+00 0.9596D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 30 0.201D+00 0.960D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.2013D+00 0.9596D-03 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 30 1 0.923D+07 0.201D+00 0.960D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.2013D+00 0.9596D-03 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 30 2 0.923D+07 0.201D+00 0.960D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 30 0.2013D+00 0.9596D-03 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 29 0.146D-05 0.100D+01 0.928D+07
1 .202142455687172373 .952054935119883792E-03
2 .202142455687172355 .952054935119883792E-03
3 .202142455687172359 .952054935119883792E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.1819D+00 0.5355D-03 0.2021D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.2224D+00 0.1693D-02 -0.2021D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.2021D+00 0.9521D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 29 0.202D+00 0.952D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.2021D+00 0.9521D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 29 1 0.928D+07 0.202D+00 0.952D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.2021D+00 0.9521D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 29 2 0.928D+07 0.202D+00 0.952D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 29 0.2021D+00 0.9521D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 28 0.142D-05 0.100D+01 0.935D+07
1 .203171620426944824 .943031788263188221E-03
2 .203171620426944810 .943031788263188221E-03
3 .203171620426944810 .943031788263188221E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.1829D+00 0.5286D-03 0.2032D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.2235D+00 0.1682D-02 -0.2032D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.2032D+00 0.9430D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 28 0.203D+00 0.943D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.2032D+00 0.9430D-03 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 28 1 0.935D+07 0.203D+00 0.943D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.2032D+00 0.9430D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 28 2 0.935D+07 0.203D+00 0.943D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 28 0.2032D+00 0.9430D-03 0.1110D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 27 0.139D-05 0.100D+01 0.941D+07
1 .204203754392744255 .935622684981639384E-03
2 .204203754392744241 .935622684981636077E-03
3 .204203754392744241 .935622684981636077E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.1838D+00 0.5226D-03 0.2042D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.2246D+00 0.1675D-02 -0.2042D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.2042D+00 0.9356D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 27 0.204D+00 0.936D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.2042D+00 0.9356D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 27 1 0.941D+07 0.204D+00 0.936D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.2042D+00 0.9356D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 27 2 0.941D+07 0.204D+00 0.936D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 27 0.2042D+00 0.9356D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 26 0.150D-05 0.100D+01 0.947D+07
1 .208522082996482908 .102109251568568375E-02
2 .208522082996482894 .102109251568568375E-02
3 .208522082996482894 .102109251568568375E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.1877D+00 0.5631D-03 0.2085D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.2294D+00 0.1852D-02 -0.2085D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.2085D+00 0.1021D-02 0.0
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 26 0.209D+00 0.102D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.2085D+00 0.1021D-02 0.0
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 26 1 0.947D+07 0.209D+00 0.102D-02 1
KFA JULICH ZAM ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.2085D+00 0.1021D-02 0.0
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 26 2 0.947D+07 0.209D+00 0.102D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 26 0.2085D+00 0.1021D-02 0.0
```



```
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 25 0.184D-05 0.100D+01 0.957D+07
1 .217294534660962699 .126760261575598906E-02
2 .217294534660962685 .126760261575598906E-02
3 .217294534660962685 .126760261575598906E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.1956D+00 0.6814D-03 0.2173D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.2390D+00 0.2358D-02 -0.2173D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.2173D+00 0.1268D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 25 0.217D+00 0.127D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.2173D+00 0.1268D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 25 1 0.957D+07 0.217D+00 0.127D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.2173D+00 0.1268D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 25 2 0.957D+07 0.217D+00 0.127D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 25 0.2173D+00 0.1268D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 24 0.249D-05 0.100D+01 0.969D+07
1 .229278626720597664 .172696113580463203E-02
2 .229278626720597650 .172696113580463203E-02
3 .229278626720597650 .172696113580463203E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2064D+00 0.8965D-03 0.2293D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2522D+00 0.3327D-02 -0.2293D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2293D+00 0.1727D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 24 0.229D+00 0.173D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2293D+00 0.1727D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 24 1 0.969D+07 0.229D+00 0.173D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2293D+00 0.1727D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 24 2 0.969D+07 0.229D+00 0.173D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 24 0.2293D+00 0.1727D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 23 0.318D-05 0.100D+01 0.981D+07
1 .238952822699617207 .221824114901741085E-02
2 .238952822699617193 .221824114901740294E-02
3 .238952822699617193 .221824114901740294E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2151D+00 0.1120D-02 0.2390D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2628D+00 0.4395D-02 -0.2390D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2390D+00 0.2218D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 23 0.239D+00 0.222D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2390D+00 0.2218D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 23 1 0.981D+07 0.239D+00 0.222D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2390D+00 0.2218D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 23 2 0.981D+07 0.239D+00 0.222D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 23 0.2390D+00 0.2218D-02 0.4163D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 22 0.368D-05 0.100D+01 0.994D+07
1 .251653714040558210 .258113754344633178E-02
2 .251653714040558030 .258113754344633178E-02
3 .251653714040558030 .258113754344633178E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2265D+00 0.1251D-02 0.2517D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2768D+00 0.5324D-02 -0.2517D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2517D+00 0.2581D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 22 0.252D+00 0.258D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2517D+00 0.2581D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 22 1 0.994D+07 0.252D+00 0.258D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2517D+00 0.2581D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 22 2 0.994D+07 0.252D+00 0.258D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 22 0.2517D+00 0.2581D-02 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 21 0.360D-05 0.100D+01 0.100D+08
1 .264722222051156225 .253247252503071001E-02
2 .264722222051155975 .253247252503071001E-02
3 .264722222051155975 .253247252503071001E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2382D+00 0.1173D-02 0.2647D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2912D+00 0.5466D-02 -0.2647D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2647D+00 0.2532D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 21 0.265D+00 0.253D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2647D+00 0.2532D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 21 1 0.100D+08 0.265D+00 0.253D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2647D+00 0.2532D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 21 2 0.100D+08 0.265D+00 0.253D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 21 0.2647D+00 0.2532D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 20 0.329D-05 0.100D+01 0.101D+08
1 .278159321407732321 .231825687728991832E-02
2 .278159321407732085 .231825687728991832E-02
3 .278159321407732085 .231825687728991832E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.2503D+00 0.1023D-02 0.2782D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.3060D+00 0.5256D-02 -0.2782D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.2782D+00 0.2318D-02 0.2776D-16
```

```
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 20 0.278D+00 0.232D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.2782D+00 0.2318D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 20 1 0.101D+08 0.278D+00 0.232D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.2782D+00 0.2318D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 20 2 0.101D+08 0.278D+00 0.232D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 20 0.2782D+00 0.2318D-02 0.5551D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 19 0.300D-05 0.100D+01 0.101D+08
1 .291967112726188846 .211775165947102208E-02
2 .291967112726188624 .211775165947100696E-02
3 .291967112726188624 .211775165947100696E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.2628D+00 0.8871D-03 0.2920D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.3212D+00 0.5056D-02 -0.2920D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.2920D+00 0.2118D-02 0.4163D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 19 0.292D+00 0.212D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.2920D+00 0.2118D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 19 1 0.101D+08 0.292D+00 0.212D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.2920D+00 0.2118D-02 0.1110D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 19 2 0.101D+08 0.292D+00 0.212D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 19 0.2920D+00 0.2118D-02 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 18 0.278D-05 0.100D+01 0.102D+08
1 .303041352485972762 .197063608322150738E-02
2 .303041352485972554 .197063608322149356E-02
3 .303041352485972554 .197063608322149356E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.2727D+00 0.7912D-03 0.3030D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.3333D+00 0.4908D-02 -0.3030D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.3030D+00 0.1971D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 18 0.303D+00 0.197D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.3030D+00 0.1971D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 18 1 0.102D+08 0.303D+00 0.197D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.3030D+00 0.1971D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 18 2 0.102D+08 0.303D+00 0.197D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 18 0.3030D+00 0.1971D-02 0.1110D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 17 0.253D-05 0.100D+01 0.102D+08
1 .317567044525844680 .179431045689849378E-02
2 .317567044525844486 .179431045689848104E-02
3 .317567044525844486 .179431045689848104E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.2858D+00 0.6806D-03 0.3176D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.3493D+00 0.4730D-02 -0.3176D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.3176D+00 0.1794D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 17 0.318D+00 0.179D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.3176D+00 0.1794D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 17 1 0.102D+08 0.318D+00 0.179D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.3176D+00 0.1794D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 17 2 0.102D+08 0.318D+00 0.179D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 17 0.3176D+00 0.1794D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 16 0.229D-05 0.100D+01 0.103D+08
1 .332475732599551141 .163092601002208721E-02
2 .332475732599550960 .163092601002207555E-02
3 .332475732599550960 .163092601002207555E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.2992D+00 0.5827D-03 0.3325D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.3657D+00 0.4565D-02 -0.3325D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.3325D+00 0.1631D-02 0.4163D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 16 0.332D+00 0.163D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.3325D+00 0.1631D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 16 1 0.103D+08 0.332D+00 0.163D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.3325D+00 0.1631D-02 0.1249D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 16 2 0.103D+08 0.332D+00 0.163D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 16 0.3325D+00 0.1631D-02 0.1527D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 15 0.208D-05 0.100D+01 0.104D+08
1 .347771649720029136 .147954774043587126E-02
2 .347771649720028969 .147954774043586589E-02
3 .347771649720028969 .147954774043586589E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3130D+00 0.4962D-03 0.3478D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3825D+00 0.4411D-02 -0.3478D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3478D+00 0.1480D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX : 15 0.348D+00 0.148D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3478D+00 0.1480D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 15 1 0.104D+08 0.348D+00 0.148D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3478D+00 0.1480D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 15 2 0.104D+08 0.348D+00 0.148D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 15 0.3478D+00 0.1480D-02 0.1110D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 14 0.187D-05 0.100D+01 0.104D+08
```

```
1 .363459181400654807 .133933090968943192E-02
2 .363459181400654668 .133933090968942704E-02
3 .363459181400654668 .133933090968942704E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3271D+00 0.4203D-03 0.36350-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3958D+00 0.4268D-02 -0.36350-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3635D+00 0.1339D-02 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 14 0.363D+00 0.134D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3635D+00 0.1339D-02 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 14 1 0.104D+08 0.363D+00 0.134D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3635D+00 0.1339D-02 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 14 2 0.104D+08 0.363D+00 0.134D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 14 0.3635D+00 0.1339D-02 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 13 0.169D-05 0.100D+01 0.105D+08
1 .379543067624345060 .120950975625498853E-02
2 .379543067624344921 .120950975625498420E-02
3 .379543067624344921 .120950975625498420E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.3416D+00 0.3537D-03 0.3795D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.4175D+00 0.4136D-02 -0.3795D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.3795D+00 0.1210D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 13 0.380D+00 0.121D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.3795D+00 0.1210D-02 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 13 1 0.105D+08 0.380D+00 0.121D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.3795D+00 0.1210D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 13 2 0.105D+08 0.380D+00 0.121D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 13 0.3795D+00 0.1210D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 12 0.155D-05 0.100D+01 0.106D+08
1 .392449694388997489 .111440750648895905E-02
2 .392449694388997378 .111440750648895514E-02
3 .392449694388997378 .111440750648895514E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.3532D+00 0.3075D-03 0.3924D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.4317D+00 0.4038D-02 -0.3924D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.3924D+00 0.1114D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 12 0.392D+00 0.111D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.3924D+00 0.1114D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 12 1 0.106D+08 0.392D+00 0.111D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.3924D+00 0.1114D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 12 2 0.106D+08 0.392D+00 0.111D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 12 0.3924D+00 0.1114D-02 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 11 0.139D-05 0.100D+01 0.107D+08
1 .409310776007584060 .100104591171238917E-02
2 .409310776007583962 .100104591171238560E-02
3 .409310776007583962 .100104591171238560E-02
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.3684D+00 0.2555D-03 0.4093D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.4502D+00 0.3922D-02 -0.4093D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.4093D+00 0.1001D-02 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 11 0.409D+00 0.100D-02 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.4093D+00 0.1001D-02 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 11 1 0.107D+08 0.409D+00 0.100D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.4093D+00 0.1001D-02 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 11 2 0.107D+08 0.409D+00 0.100D-02 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 11 0.4093D+00 0.1001D-02 0.1110D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 10 0.124D-05 0.100D+01 0.107D+08
1 .426585689962476117 .896320510901656143E-03
2 .426585689962476020 .896320510901652998E-03
3 .426585689962476020 .896320510901652998E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.3839D+00 0.2107D-03 0.4266D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.4692D+00 0.3814D-02 -0.4266D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.4266D+00 0.8963D-03 0.4163D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 10 0.427D+00 0.896D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.4266D+00 0.8963D-03 0.6939D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 10 1 0.107D+08 0.427D+00 0.896D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.4266D+00 0.8963D-03 0.1110D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 10 2 0.107D+08 0.427D+00 0.896D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 10 0.4266D+00 0.8963D-03 0.1388D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 9 0.111D-05 0.100D+01 0.108D+08
1 .444280167079080524 .799698903979389445E-03
2 .444280167079080440 .799698903979389445E-03
3 .444280167079080440 .799698903979389445E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.3999D+00 0.1722D-03 0.4443D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.4887D+00 0.3714D-02 -0.4443D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.4443D+00 0.7997D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 9 0.444D+00 0.800D-03 3
```

```
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.4443D+00 0.7997D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 9 1 0.108D+08 0.444D+00 0.800D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.4443D+00 0.7997D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 9 2 0.108D+08 0.444D+00 0.800D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 9 0.4443D+00 0.7997D-03 0.8327D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 8 0.981D-06 0.100D+01 0.109D+08
1 .462399330804898493 .710686080781794643E-03
2 .462399830804898437 .710686080781794643E-03
3 .462399830804898437 .710686080781794643E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.4162D+00 0.1395D-03 0.4624D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.5086D+00 0.3622D-02 -0.4624D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.4624D+00 0.7107D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 8 0.462D+00 0.711D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.4624D+00 0.7107D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 8 1 0.109D+08 0.462D+00 0.711D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.4624D+00 0.7107D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 8 2 0.109D+08 0.462D+00 0.711D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 8 0.4624D+00 0.7107D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 7 0.891D-06 0.100D+01 0.110D+08
1 .476896447058386089 .645955357249826162E-03
2 .476896447058386033 .645955357249826162E-03
3 .476896447058386033 .645955357249826162E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.4292D+00 0.1174D-03 0.4769D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.5246D+00 0.3554D-02 -0.4769D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.4769D+00 0.6460D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 7 0.477D+00 0.646D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.4769D+00 0.6460D-03 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 7 1 0.110D+08 0.477D+00 0.646D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.4769D+00 0.6460D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 7 2 0.110D+08 0.477D+00 0.646D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 7 0.4769D+00 0.6460D-03 0.1110D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 6 0.783D-06 0.100D+01 0.111D+08
1 .495853049902825430 .569162803085455948E-03
2 .495853049902825388 .569162803085453942E-03
3 .495853049902825388 .569162803085453942E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.4463D+00 0.9323D-04 0.4959D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.5454D+00 0.3475D-02 -0.4959D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.4959D+00 0.5692D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 6 0.496D+00 0.569D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.4959D+00 0.5692D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 6 1 0.111D+08 0.496D+00 0.569D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.4959D+00 0.5692D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 6 2 0.111D+08 0.496D+00 0.569D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 6 0.4959D+00 0.5692D-03 0.8327D-16
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 5 0.685D-06 0.100D+01 0.112D+08
1 .515255099873250563 .498861521317944508E-03
2 .515255099873250522 .498861521317944508E-03
3 .515255099873250522 .498861521317944508E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.4637D+00 0.7315D-04 0.5153D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.5668D+00 0.3402D-02 -0.5153D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.5153D+00 0.4989D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 5 0.515D+00 0.499D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.5153D+00 0.4989D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 5 1 0.112D+08 0.515D+00 0.499D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.5153D+00 0.4989D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 5 2 0.112D+08 0.515D+00 0.499D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 5 0.5153D+00 0.4989D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 4 0.595D-06 0.100D+01 0.113D+08
1 .535109148857847799 .434699602003570129E-03
2 .535109148857847772 .434699602003570129E-03
3 .535109148857847772 .434699602003570129E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.4816D+00 0.5664D-04 0.5351D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.5886D+00 0.3337D-02 -0.5351D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.5351D+00 0.4347D-03 0.2776D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 4 0.535D+00 0.435D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.5351D+00 0.4347D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 4 1 0.113D+08 0.535D+00 0.435D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.5351D+00 0.4347D-03 0.1110D-15
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 4 2 0.113D+08 0.535D+00 0.435D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 4 0.5351D+00 0.4347D-03 0.1527D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 3 0.514D-06 0.100D+01 0.114D+08
1 .555421914896147895 .376343172221704899E-03
```

```

2 .555421914896147881 .376343172221704899E-03
3 .555421914896147881 .376343172221704899E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.4599D+00 0.4322D-04 0.5554D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.6110D+00 0.3277D-02 -0.5554D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.5554D+00 0.3763D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 3 0.555D+00 0.376D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.5554D+00 0.3763D-03 0.5551D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 3 1 0.114D+08 0.555D+00 0.376D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.5554D+00 0.3763D-03 0.9714D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 3 2 0.114D+08 0.555D+00 0.376D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 3 0.5554D+00 0.3763D-03 0.1249D-15
STEP1-NR,R,EXPT,AN(I): 2 0.457D-06 0.100D+01 0.115D+08
1 .571629264902940373 .334550291071680512E-03
2 .571629264902940373 .334550291071680512E-03
3 .571629264902940373 .334550291071680512E-03
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.5145D+00 0.3459D-04 0.5716D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.6288D+00 0.3236D-02 -0.5716D-01
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.5716D+00 0.3346D-03 0.1388D-16
STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX: 2 0.572D+00 0.335D-03 3
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.5716D+00 0.3346D-03 0.4163D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 2 1 0.115D+08 0.572D+00 0.335D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.5716D+00 0.3346D-03 0.8327D-16
STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX: 2 2 0.115D+08 0.572D+00 0.335D-03 1
ZREAL>>>:I,SIGI,THETA(I),FTH: 2 0.5716D+00 0.3346D-03 0.1110D-15
0.115D+08 0.572D+00 0.335D-03 310.9 167.8 3332.4
0.114D+08 0.555D+00 0.376D-03 316.9 176.1 3366.2
0.113D+08 0.535D+00 0.435D-03 324.4 186.5 3408.6
0.112D+08 0.515D+00 0.494D-03 331.8 196.7 3450.1
0.111D+08 0.496D+00 0.569D-03 339.0 206.6 3490.9
0.110D+08 0.477D+00 0.646D-03 346.1 216.4 3530.8
0.109D+08 0.462D+00 0.711D-03 351.5 223.9 3561.4
0.108D+08 0.444D+00 0.800D-03 358.3 233.3 3599.8
0.107D+08 0.427D+00 0.896D-03 365.0 242.6 3637.5
0.107D+08 0.409D+00 0.100D-02 371.5 251.6 3674.4
0.106D+08 0.392D+00 0.111D-02 377.9 260.4 3710.5
0.105D+08 0.380D+00 0.121D-02 382.8 267.3 3738.3
0.104D+08 0.363D+00 0.134D-02 389.0 275.8 3773.1
0.104D+08 0.348D+00 0.148D-02 395.0 284.1 3807.2
0.103D+08 0.332D+00 0.163D-02 400.9 292.3 3840.6
0.102D+08 0.318D+00 0.179D-02 406.7 300.3 3873.4
0.102D+08 0.303D+00 0.197D-02 412.4 308.2 3905.5
0.101D+08 0.292D+00 0.212D-02 416.8 314.2 3930.1
0.101D+08 0.278D+00 0.232D-02 422.2 321.7 3961.0
0.100D+08 0.265D+00 0.253D-02 427.6 329.1 3991.3
0.994D+07 0.252D+00 0.258D-02 432.9 335.3 4021.1
0.981D+07 0.239D+00 0.222D-02 438.1 338.6 4050.9
0.969D+07 0.229D+00 0.173D-02 442.4 339.0 4075.1
0.957D+07 0.217D+00 0.127D-02 448.2 339.5 4107.5
0.947D+07 0.209D+00 0.102D-02 454.2 340.1 4141.4
0.941D+07 0.204D+00 0.936D-03 460.5 340.6 4177.0
0.935D+07 0.203D+00 0.943D-03 467.1 341.2 4214.3
0.928D+07 0.202D+00 0.952D-03 474.0 341.8 4253.5
0.923D+07 0.201D+00 0.960D-03 479.8 342.3 4285.9
0.917D+07 0.200D+00 0.970D-03 487.4 342.9 4328.9
0.910D+07 0.199D+00 0.980D-03 495.3 343.6 4374.0
0.903D+07 0.198D+00 0.992D-03 503.7 344.3 4421.3
0.896D+07 0.197D+00 0.100D-02 512.5 345.0 4470.9
0.890D+07 0.196D+00 0.101D-02 519.7 345.6 4511.8
0.883D+07 0.194D+00 0.103D-02 529.4 346.4 4566.3
0.875D+07 0.193D+00 0.104D-02 539.5 347.3 4623.4
0.867D+07 0.191D+00 0.106D-02 550.1 348.1 4683.4
0.858D+07 0.190D+00 0.107D-02 561.2 349.1 4746.3
0.850D+07 0.188D+00 0.109D-02 572.9 350.0 4812.2
0.845D+07 0.187D+00 0.110D-02 582.6 350.8 4867.0
0.845D+07 0.185D+00 0.130D-02 595.3 354.1 4938.7
0.854D+07 0.183D+00 0.320D-02 608.1 369.5 5010.8
0.114D+08 0.182D+00 0.155D-01 620.4 397.6 5080.4
0.195D+08 0.180D+00 0.661D-01 631.8 425.6 5145.1
0.343D+08 0.178D+00 0.148D+00 640.3 442.5 5193.1
KPA NUCH ZAM 0.704D+08 0.176D+00 0.376D+00 650.7 463.1 5251.7
0.135D+09 0.174D+00 0.867D+00 660.5 482.6 5307.3
0.181D+09 0.160D+00 0.143D+01 669.9 501.2 5360.1

```

0.129D+09	0.125D+00	0.135D+01	678.7	518.8	5410.3
0.620D+09	0.771D-01	0.953D+00	687.2	535.6	5457.9
0.484D+08	0.559D-01	0.100D+01	693.4	547.9	5493.0
0.363D+08	0.343D-01	0.117D+01	701.0	563.1	5536.1
0.279D+08	0.192D-01	0.150D+01	708.3	577.5	5577.1
0.221D+08	0.100D-01	0.209D+01	715.1	591.1	5615.9
0.181D+08	0.504D-02	0.307D+01	721.7	604.1	5652.8
0.157D+08	0.296D-02	0.418D+01	726.5	613.7	5680.2
0.136D+08	0.153D-02	0.618D+01	732.4	625.5	5713.6
0.120D+08	0.823D-03	0.897D+01	738.0	636.6	5745.3
0.108D+08	0.460D-03	0.128D+02	743.4	647.2	5775.4
0.995D+07	0.267D-03	0.178D+02	748.4	657.2	5804.1
0.901D+07	0.161D-03	0.242D+02	753.2	666.8	5831.2

IDWR 11 = 7200.0011SEC SUCCESSFULLY PROCESSED

THERE ARE 0.1133D+22 ATOMS ADSORBED

THE FLUX AT THE OUTLET IS ABOUT 0.2581D+15 ATOMS/SEC

CALLIO 0

PRINTLEVEL CHANGED TO 1

AM ENDE DES PROGRAMMABLAUFS IST ES MOEGELICH, DIE ZEIT BIS VOR
DEN ANFANGSZEITPUNKT ZURUECKZUSETZEN, WENN DIE OPTIONEN \$NNOUPD\$
UND \$TNCUPD\$ WIRKSAM SIND.

OPTION REQUESTED: \$TNOUPD\$

OPTION REQUESTED: \$ENDOPT\$

IDWR 12 :ACTUAL TIME SUCCESSFULLY SET TO

140.0000 SEC

ENDE DES BEISPIELS-----ENDE DES BEISPIELS

Installierung und Test des Programms

1. Installierung

Der Quelltext steht auf dem Time Sharing System der KFA zur Verfügung und belegt dort 23 Pages (à 4 kB) Speicherplatz. Auf der Batchanlage sind die Unterprogramme zur Stoffwertberechnung sowie das Assemblerunterprogramm CCCODE in übersetzter Form zu einer Bibliothek zusammengefaßt (HEXTBIB im Beispielprogramm).

Bei Verwendung des WATFIV-Testkompilers anstelle des H-Extended-Kompilers müssen Routinen angeschlossen werden, in denen die Aufrufe der Unterprogramme MASKE und CCCODE durch WATFIV-kompatible Routinen ersetzt sind (sind vorhanden, werden aber im Rahmen dieser Beschreibung nicht behandelt). Dabei geht die Möglichkeit des variablen Condition Codes verloren.

Beim Betrieb auf anderen Rechenanlagen oder mit anderen Betriebssystemen müssen diese Routinen u.U. ebenfalls modifiziert werden.

Die Steueranweisungen für den Übersetzer- und Binderlauf sowie für das Anlegen der Restartdatei sind dem Musterprogramm und den zugehörigen Erläuterungen zu entnehmen. Die Dateien für den SP-Fluß und die Temperatur/Geschwindigkeitsverteilungen müssen durch die Betreiber der entsprechenden Generierprogramme (z.Zt. FRESCO und ACORDE) erstellt und angelegt werden. Für diese Dateien muß die RACF-Berechtigung READ dem Betreiber des Programms PLATO eingeräumt werden.

Die Bibliothek HEXTBIB wurde mit folgendem Dataset Control Block angelegt: RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200. Durch die SPACE Angabe ist die Deklaration als 'partitioned dataset' durchzuführen.

2. Testprozedur

Da dem Autor keine geeigneten Meßdaten bekannt sind, müssen sich die nachstehend beschriebenen Tests auf die Numerik beschränken (Meßdaten sind für den Langzeitbetrieb unter Normalbedingungen mit Diffusion in die Rohrwände als essentieller Komponente gesammelt).

Für den stationären Zustand folgt aus dem Differentialgleichungssystem unmittelbar (mit $\dot{\sigma} = 0$) für jedes Segment

$$n_x = \bar{v}_x \sigma_x M_0 / \alpha_x^*$$

Daß die programmierte Numerik diese Beziehung erfüllt, läßt sich aus dem beigelegten Beispiellauf sofort verifizieren; z.B. für Segment 2:

$\alpha_2^* = 0.650 \cdot 10^4$, $\sigma_2 = 0.572$, $\bar{v}_2 = 0.272 \cdot 10^{-3}$ mit $M_0 = 4.8 \cdot 10^{14}$ liefert für $n_2 = 0.11489 \cdot 10^8$.

Weiterhin muß mit $\dot{\sigma} = 0$ der SP-Fluß durch alle Segmente konstant sein (Kontinuitätsgleichung). Dies ist bis auf Rechnergenauigkeit erfüllt.

Diese stationären Werte blieben bei Tests mit bis zu 3000 Zeitschritten und Schrittweiten von 1/1000 sec bis zu 1000 sec. ungeändert (die Schrittweite war jeweils während eines Tests konstant).

Eine Reduzierung der Segmentanzahl von 86 auf 43 änderte die stationären Resultate nicht. Dieselbe Maßnahme lieferte bei einer Schrittweite von 500 sec. und einer störfalltypischen SP-Konzentration von ca. 10^{12} Atomen/cm³ in einem Testlauf bei festgehaltenem SP-Fluß und einer Erhöhung der Gaseinlaßtemperatur um 700 K (Wandtemperatur 1200 K) über 180 Zeitschritte Unterschiede in den SP-Konzentrationen von bis zu 2.5 %.

Werden für die Anfangswerte um Größenordnungen vom Gleichgewicht abweichende Zahlen eingesetzt, so muß beachtet werden, daß die Zeit, die erforderlich ist, um den stationären Zustand zu erreichen, mit wachsendem Q_0 größer wird und in ungünstigen Fällen mehr als 10^{15} sec (!) betragen kann, da sich die typische Desorptionszeit zu $(h + \alpha^*)^{-1} \bar{v}^{-1}$ berechnet.

Die Mehrzahl aller Testrechnungen sind mit $Q_0 = 55\,000 \text{ cal mol}^{-1}$ durchgeführt worden. Für einzelne Tests wurde Q_0 zu $45\,000 \text{ cal mol}^{-1}$ oder zu $85\,000 \text{ cal mol}^{-1}$ gewählt. Durch diese Grenzwerte ist der physikalisch sinnvolle Bereich abgedeckt.

3. Leistungsmerkmale

Bei Verwendung des IBM H-EXTENDED (ENHANCED)-Kompilers (Optimierungsstufe 3) beträgt die Übersetzungszeit ca. 3 sec.*

Bei 61 Segmenten betrug der CPU-Zeitbedarf bei Tests und Produktionsläufen typischerweise 0.065 bis 0.135 sec * je Zeitschritt. Da das Programm bei realistischen Bedingungen u.U. eine erhebliche Anzahl I/O-Operationen durchführen muß, wird die Verweilzeit im Rechner in der Regel durch den Zeitbedarf für I/O und die zugehörigen Systemrequests charakterisiert. Bei Verwendung des WATFIV-Kompilers beträgt die Ausführungszeit typischerweise etwa das vier- bis fünffache der oben angegebenen Zeit.

* Anmerkung: Die Zeitangaben beziehen sich auf den Rechner IBM 3033 U08.

4. Sonstiges

Die weiteren in DIN 66230 (Kapitel 3 und 4) vorgesehenen Angaben entfallen, da das Programm zunächst nur für den Betrieb auf dem Großrechnersystem der KFA vorgesehen ist. Alle Anforderungen des Programms werden durch die dort standardmäßig vorhandene Hard- und Software abgedeckt.

Die Eingaben an das Betriebssystem sowie die vom Benutzer des Programms zusammenzustellenden Eingaben werden am Bildschirm (TSS oder auch VSPC) zu einem Job zusammengefaßt. Dieser Job wird dann zur Stapelverarbeitung übergeben.

Anhang A

Anhang A umfaßt eine Auflistung des Quelltexts des Programms PLATO.

```

C *** THE FOLLOWING FORTRANPROGRAM WILL BE USED
C *** FOR PLATE-OUT-CALCULATIONS.
C
C *** THE IDENTIFICATION OF THIS VERSION IS 1.00
C
C *** AUTHOR: K.-D. EMMHARDT, ISF
C
C
C
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /GEOM/ DIAM,XLEN ,RCHHN,AREA4
      REAL*8 AREA4
C *** DIAM -> DIAMETER IN CM
C *** XLEN -> LENGTH IN CM
      LOGICAL*1 NATCON
      COMMON /UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),THETA(100),
      * ALPHA(100),CBETA,RGAS,GADS,GSADS,CSLAMB,VGAS(100),HCOEF(100),
      * PGAS,AZ,TTIME,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
C *** AN -> CONCENTRATION N IN ATOMS/CM3
C *** SIGMA-> DEGREE OF SURFACE COVERAGE
C *** TEMPG-> TEMPERATURE OF THE GAS IN CENTIGRADE
C *** TEMPW-> TEMPERATURE OF THE WALL IN CENTIGRADE
C *** THETA-> DESORPTION CONSTANT
C *** ALPHA-> ACCOMODATION COEFFICIENT
C *** CBETA-> PENETRATION COEFFICIENT
C *** RGAS -> GAS CONSTANT R 2 CAL/MOL
C *** GADS -> ADSORPTION ENERGY
C *** GSADS-> SUBLIMATION ENERGY
C *** CSLAMB> DECAY CONSTANT
C *** VGAS -> VELOCITY (GAS) IN CM/S
C *** HCOEF-> MASS TRANSFER COEFFICIENT
C *** PGAS -> GAS PRESSURE
C *** IXSTEP> NUMBER OF STEPS IN SPACE
C *** IXMAX-> IXSTEP+1
C *** NATCON> FALSE: STANDARD FLOW SENSE;TRUE: INVERSE FLOW SENSE
C
C
      COMMON /IO/ INP5,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
C *** COMMON IO CONTAINS INPUT/OUTPUT-CHANNELS;SUBROUTINE IOCON
C *** MAY BE USED TO REDEFINE THEM. INITIALAZATION FOLLOWS.
C
C
C *** UNIT 10 IS USED FOR RESTART FACILITY;IT IS USED IN DA-MODE
C *** FIRST RECORD CONTAINS NUMBER OF LAST INFORMATION RECORD (IDWR),
C *** THE NUMBER OF PROCESSED CYCLES AND ELAPSED REAL TIME.
C *** THIS UNIT CAN NOT BE REDEFINED BY IOCON.
C
C
      DEFINE FILE 10(100,1002,U,IDWR0)
      IOUT10=10
      IDWR=2
C
C
C *** UNIT INP5 IS STANDARD INPUT CHANNEL
C
100 INP5=5
C
C *** UNIT INPT IS INPUTCHANNEL FOR TEMPERATURES AND GAS-VELOCITIES
C
      INPT=9
C
C *** UNIT INPN IS INPUTCHANNEL FOR CONCENTRATIONS
C

```

```

      INPN=11
C
C *** UNIT IOUT6 IS STANDARD OUTPUT CHANNEL
C
      IOUT6=6
C
C *** ILEVEL DESCRIBES INFORMATION LEVEL
C
      ILEVEL=1
C
C *** CALL FOR INITIALIZATION PROCESS
C
      CALL IOCON
      CALL INIT
C
C *** CALL FOR CONTROL SUBROUTINE
C
      CALL CONTRL(IRC)
C
C *** TERMINATION OF THE EXECUTION OF THE PROGRAM
C
      STOP
      END
C
C
C
C
C
      SUBROUTINE IOCON
      COMMON /IO/ INP5,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
C *** THIS SUBROUTINE IS RESPONSIBLE FOR THE INPUT/OUTPUT-CONTROL
C
C *** PROGRAM READS NOW NEW IO-CHANNELS AND PRINTLEVEL
C *** THE VALUE 0 MEANS 'NO CHANGE'
C
      READ (INP5,5000,END=9999,ERR=9999) INP,IOUT,IOL,INPTT,INPNN
5000  FORMAT (5I3)
C
C
C *** READ INFORMATION IS NOW TRANSFERRED TO STORAGE AND
C *** INFORMATION MESSAGES ARE PRINTED
C
      IF (INP.EQ.INP5.OR.INP.EQ.0) GOTO 200
      WRITE( IOUT6,6000) INP5,INP
6000  FORMAT ('0 INPUTCHANNEL INP5 ',I4,' NOW CHANGED TO ',I4)
      INP5=INP
200   IF (IOUT.EQ.IOUT6.OR.IOUT.EQ.0) GOTO 300
      WRITE (IOUT6,6001) IOUT6,IOUT
      IOUT6=IOUT
6001  FORMAT ('0 OUTPUTCHANNEL IOUT6 ',I4,' NOW CHANGED TO ',I4)
300   IF (IOL.EQ. ILEVEL.OR.IOL.EQ.0) GOTO 400
      WRITE( IOUT6,6002) ICL
      ILEVEL=IOL
6002  FORMAT('0 PRINTLEVEL CHANGED TO ',I3)
400   IF (INPTT.EQ.INPT .OR. INPTT.EQ.0) GOTO 500
      WRITE (IOUT6,6004) INPT,INPTT
      INPT=INPTT
6004  FORMAT('0 INPUTCHANNEL INPT ',I4,' NOW CHANGED TO ',I4)
500   IF (INPNN.EQ.INPN .OR. INPNN.EQ.0) GOTO 999
      WRITE (IOUT6,6005) INPN,INPNN
      INPN=INPNN

```

```

6005 FORMAT('O INPUTCHANNEL   INPN  ',I4,' NOW CHANGED TO ',I4)
999  RETURN
C
C
C *** ERROR EXIT; PROGRAM WILL BE TERMINATED AFTER STORAGE DUMP
C
9999 WRITE(IOUT6,6003)
6003 FORMAT(' ***** ERROR DURING CHANGE OF IC-UNITS ',/IX,
* '***** IOCON: EXECUTION TERMINATED')
      CALL ABEND(9999)
      RETURN
      END
C
C
C
C SUBROUTINE INIT (INCLUDES RESTART OPTION)
C
      SUBROUTINE INIT
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /GEOM/ DIAM,XLEN ,RCHRN,AREA4
      REAL*4 AREA4,TEXTU(30)
      COMMON /OPTCN/ STTIM,QUPDN,QUPDT,QSTG,CADD
      COMMON /UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),THETA(100),
* ALPHA(100),CBETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),HCOEF(100),
* PGAS,AZ,TTIME,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      LOGICAL*1 NATCON,ATEX(40),QUPDN,QUPDT,QSTG,QADD
      REAL*4 DIAM4
      COMMON /IO/ INPS,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWRO,INPT,INPN
      QUPDN=.TRUE.
      QUPDT=.TRUE.
      QSTG=.FALSE.
      QADD=.FALSE.
C
C
C
C *** INPUT OF STARTTIME(TTIME), SOME SYSTEMPARAMETERS AND THE
C *** NUMBER OF X-STEPS(IXSTEP) FROM STANDARD INPUT UNIT. IF TTIME
C *** HAS A NEGATIVE VALUE, THE RESTART OPTION IS USED.
C
C
      READ (INPS,*) TTIME,XLEN,QADS,QSADS,CSLAMB,IXSTEP,BETA,RCHRN,PGAS
C
C
C *** A IDENTIFICATION TEXT IS READ FROM UNIT INPT,I.E. THE TAPE WHICH
C *** CONTAINS THE TEMPERATURES AND THE GAS VELOCITY. THE TEXT IS
C *** PRINTED TO STANDARD OUTPLT MEDIUM (IF ILEVEL >= 4).
C
C
      READ(INPT,5500,END=50,ERR=50) ATEX
      5500 FORMAT(40A1)
      50  IF (ILEVEL.GE.4) WRITE(IOUT6,6666) ATEX
      6666 FORMAT(10X,40A1)
C
C
C *** AN IDENTIFICATION TEXT IS READ FROM UNIT INPN,I.E. THE TAPE WHICH
C *** CONTAINS THE CONCENTRATIONS. THE TEXT IS PRINTED TO STANDARD
C *** OUTPUT MEDIUM (IF ILEVEL >=4).
C
C
      READ(INPN,END=60,ERR=60) TEXTU
      60  IF (ILEVEL .GE.4) WRITE (IOUT6,6667) TEXTU
      6667 FORMAT(5X,30A4)
C
C
C *** INPUT FROM UNIT INPT: NUMBER OF X-STEPS IN THE TEMPERATURE FILE,
C *** THE HYDRAULIC DIAMETER AND THE FREE CROSS SECTION (IN REAL*4).

```

```

C
C
  READ(INPT,END=9000,ERR=9000) ITSTEP,DIAM4,AREA4
  DIAM=DIAM4*200.000/3.141600
  CBETA=1.000-BETA
  IXMAX=IXSTEP+1
  TCORR=273.00
C *** TCORR-> CONVERTS KELVIN AND CENTIGRADE
  AZ=137.00
C *** AZ ----> ELEMENTS MASS NUMBER ;AT MOMENT FIXED FOR CS-137
  RGAS=2.00
C *** R ----> GAS CONSTANT IN CAL/MUL
C
C
C *** IF TTIME < 0 : THE REAL TTIME,AN AND SIGMA ARE SUPPLIED BY THE
C *** RESTART SUBROUTINE (RSTART); RSTART RETURNS TO
C *** LABEL '90'.
C *** IF TTIME >=0 : AN AND SIGMA ARE READ FROM STANDARD INPUT UNIT.
C
C
  IF (TTIME .LT. 0 ) CALL RSTART(&90)
  DO 20 I=2,IXMAX
80  READ (INP5,*) AN(I),SIGMA(I)
C
C
C *** LABEL '90' IS RETURN LABEL FOR 'RSTART'
C
90  CONTINUE
C
C
C *** PRINT OF STARTTIME (TTIME), NUMBER OF X-STEPS ON TAPE AND OF THE
C *** IDENTIFICATION TEXTS (TAKEN FROM INPT AND INPN) AS WELL AS THE
C *** NUMBER OF PIPES AND THE FREE CROSS SECTION
C
  WRITE(IOUT6,6004) TTIME,ITSTEP,RGHRN,AREA4,ATEX,TEXTU
6004  FORMAT('1 STARTTIME OF THIS RUN IS ',F15.3,' SEC',/,
  F '0NUMBER OF X-STEPS ON TAPE (TEMPERATURES) IS ',I7,/,
  F '0',/, ' NUMBER OF PIPES: ',F7.0,' FREE CROSS SECTION:',F7.3,
  F ' N2',/, '1',/, '0      ',F40A1,/, '0      ',F30A4)
C
C
C *** JUMP TO TADAP-ROUTINE (ENTRY TADAP0) IN ORDER TO FETCH THE
C *** TEMPERATURES AND THE GAS VELOCITIES FROM UNIT INPT.
C
C
  CALL TADAP0
  CALL NADAP0(AREA4)
C
C
C *** CALCULATION OF DESORPTION CONSTANT AND ACCOMODATION COEFFICIENT
C *** (USING THE VALUES GIVEN BY INIOTAKIS).
C
C
  DO 100 I=2,IXMAX
  TENK=TEMPW(I)+TCORR
  THETA(I)=1.31011*TEMK*DEXP(-CADS/RGAS/TEMK)*DEXP((QADS-QSADS)/
  F RGAS/TEMK*SIGMA(I))
  ALPHA(I) =3.6303*DSQRT(TEMK/AZ)
100  CONTINUE
C
C
C *** PRINTOUT OF INITIAL CGNDITION FOLLOWS
C

```

```
C
      WRITE(IQUT6,6000) IXSTEP
6000  FORMAT('O ***** PLATE-GUT-PROGRAM VERSION 1.00 *****',
    *//IX,'NUMBER OF X STEPS',IS,//8X ,
    * 'AN          SIGMA        THETA       TEMPG   TEMPW     ALPHA')
      DO 200 I=2,IXMAX
      WRITE(IQUT6,6001) I, AN(I),SIGMA(I),THETA(I),TEMPG(I),
    * TEMPW(I),ALPHA(I)
200   CONTINUE
6001  FORMAT(13,3D11.3,2F7.2,D11.3)
      WRITE (IQUT6,6003) DIAM,XLEN,QADS,QSADS,CSLAMB,AZ,CBETA
6003  FORMAT(/IX,'DIAMETER      ',F7.3,' CM',/IX,
    *           'LENGTH       ',F9.3 ,' CM',/IX,
    *           'QADS         ',F10.0,3X ,' CAL/MGL',/IX,
    *           'QSADS        ',F10.0,3X ,' CAL/MGL',/IX,
    *           'DECAY        ',D11.3 ,'      1/S',/IX,
    *           'ELEMENT MASS',F7.0,      /IX,
    *           'PENETRATION ',F11.4)
      IF (ILEVEL .GT.3) WRITE(IQUT6,6002)
6002  FORMAT(/IX,'INIT>>>> INITIALIZATION - PART 1 FINISHED')
      RETURN
C
C
C *** ERROR-EXIT (TERMINATION OF PROGRAM EXECUTION)
C
C
9000  WRITE(IQUT6,6005) INPT
6005  FORMAT('O+++++ ERROR: ENG/ERROR-CONDITION FULLILLED DURING',/,
    F ' ATTEMPT TO READ FROM UNIT INPT',I7.,/,
    F 'JOB WILL BE TERMINATED ')
      CALL ABEND(4010)
      RETURN
      END
C
C
C
C
C
SUBROUTINE CNTRL(IRC)
C
C
C *** CENTRAL CONTROL SUBROUTINE
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /IO/ INP5,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWRO,INPT,INPN
      COMMON /GEOM/ DIAM,XLEN ,RCHRN,AREA4
      COMMON /OPTON/ STTIM,QUPDN,QUPDT,QSTQ,QADD
      COMMON/UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),
    * THETA(100),ALPHA(100),CBETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),
    * HCGEF(100),PGAS,AZ,TTIME,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      LOGICAL*1 NATCON,ITEXT(79),CC,CCN,ACCN/'N'/,QUPDN,QUPDT,QSTQ
      LOGICAL*1 QADD
      REAL*4 AREA4
C
C
C
C *** INITIALIZATION PART FOR CNTRL
C
      DATA READNO /'*READNO*/ ,
    * REMARK /'*REMARK*/ , RUNSIM /'*RUNSIM*/ , READVG /'*READVG*/ ,
    * CALLIO/'*CALLIO*/ , CALLEX/'*CALLEX*/ , CABEND/'*CABEND*/ ,
    * DATA OPTION/'*OPTION*/ , SETTIM/'*SETTIM*/ , STOTIM/'*STOTIM*/ ,
    * RCLTIM/'*RCLTIM*/ ,
    * EQUIVALENCE (CC,ICC),(CCN,ICCN)
      NATCON=.FALSE.
```

```

CCN=ACCN
IF (ILEVEL .GE.4) WRITE (IOUT6,6000)
6000 FORMAT ('CONTROL>>>> S.R. ENTERED')
C
C
C *** THE FOLLOWING STATEMENT READS A COMMAND AND A CONTROLNUMBER.
C *** THE MEANING OF THIS CONTROLNUMBER DEPENDS ON THE COMMAND.
C
100 READ(INP5,5000) ATEXT,ICNTR
5000 FORMAT(A8,15)
C
C
C *** DEPENDING ON PRINTLEVEL, COMMAND AND CONTROLNUMBER RE PRINTED
C
IF (ILEVEL.GE.3) WRITE(IGOUT6,6001) ATEXT,ICNTR
6001 FORMAT(1X,A8,15)
C
C
C *** *DISTRIBUTION BCX*
C
IF (ATEXT .EQ. REMARK) GOTO 200
IF (ATEXT .EQ. READNO) GOTO 300
IF (ATEXT .EQ. READVG) GOTO 400
IF (ATEXT .EQ. OPTICN) GOTO 500
IF (ATEXT .EQ. SETTIN) GOTO 550
IF (ATEXT .EQ. STOTIM) GOTO 600
IF (ATEXT .EQ. RCLTIM) GOTO 650
IF (ATEXT .EQ. RUNSIN) GOTO 700
IF (ATEXT .EQ. CALLIO) GOTO 800
IF (ATEXT .EQ. CALLEX) GOTO 900
IF (ATEXT .EQ. CABEND) GOTO 820
C
C
C *** IF THE GIVEN COMMAND IS UNKNOWN,AN ERROR MESSAGE IS PRINTED,
C *** A STORAGE DUMP GIVEN AND THE EXECUTION TERMINATED
C
WRITE(IGOUT6,6010) ATEXT,ICNTR
6010 FORMAT(' ***** SORRY, S.R. CTRL DOES NOT UNDERSTAND THE *
2 ,FOLLOWING COMMAND-LINE : ',/1X,A8,15,/,
3 ' ***** CTRL: EXECUTION TERMINATED ')
CALL ABEND(5999)
C
C
C *** IN THE FOLLOWING SECTIONS THE COMMANDS ARE EXECUTED
C ***
C
C *REMARK*
C
200 IF (ICNTR.EQ.0 ) ICNTR=1
C
C *** ICNTR DENOTES NUMBER OF COMMENTLINES.
C *** THE COMMENT CAN ONLY BE READ FROM STANDARD INPUT UNIT.
C
DO 220 I=1,ICNTR
C *** 'CC' IS AN CONTROLCHARACTER FOR PRINTCONTROL
READ (INP5,5001,END=205,ERR=205) CC,ITEXT
205 IF (ICC.EQ.ICCN) GOTO 220
WRITE (IGOUT6,6002) ITEXT
5001 FORMAT (80A1)
6002 FORMAT (80A1)
C *** CONTROLCHARACTER 'CC' SHOULD BE 'N' FOR 'NOPRINT'
220 CONTINUE
GOTO 100
C
C

```



```

C *READNO*
C
C *** ICONTR DENOTES INPUT UNIT; DEPENDING ON FLOW SENSE,AN(1) OR
C *** AN(IXMAX+1) IS READ,I.E. THE INCOMING CONCENTRATION.
C
300  IF (ICONTR.EQ. 0) ICONTR=INPS
      IF (OUPDN .OR. CUPDT) WRITE (IOUT6,6390)
6390  FORMAT (' +++++ WARNING: NO-UPDATE REQUESTS ISSUED ')
      CUPCN = .FALSE.
      OUPDT = .FALSE.
      IF (NATCON) READ (ICONTR,*.END=399,ERR=399) AN(1)
      IF (.NOT.NATCON) READ (ICONTR,*.END=399,ERR=399) AN(IXMAX+1)
      IF (NATCON) AN(1)=AN(1)/VGAS(2)/AREA4/10000.000
      IF (.NOT.NATCON)AN(IXMAX+1)=AN(IXMAX+1)/VGAS(IXMAX)/AREA4/10000.00
      IF (NATCON) WRITE (IOUT6,6003) AN(1),ICONTR
      IF (.NOT.NATCON) WRITE(IOUT6,6003) AN(IXMAX+1),ICONTR
6003  FORMAT(' NEW VALUE FOR NO      ',D11.3,' FROM UNIT ',I3 )
      GOTC 100
399   IRC=399
      WRITE (6,6399) ICONTR,IRC
6399  FORMAT (' +++++ ERROR: END/ERR-CONDITION FULLFILLED DURING',/
* , ' ATTEMPT TO READ NO FROM UNIT ',I4,/.
* ' +++++ CONTRL: IRC WAS ',I4,' CONTRL RETURNS TO MAIN')
      RETURN
C
C
C *READVG*
C
C *** ICCNTR DENOTES INPUT UNIT; GAS FLOW SENSE AND PRESSURE ARE READ.
C *** A NEGATIVE 1ST VALUE DENOTES 'INVERSE FLOW SENSE' AND THE
C *** FLAG FOR INVERSE FLOW SENSE (NATCON) IS SET.
C *** A FOLLOWING POSITIVE 1ST VALUE CLEARS THE FLAG.
C
400  IF (ICONTR.EQ.0) ICONTR=INPS
      READ (ICCNTR,*.END=499,ERR=499) VGASS,PGAS
      WRITE (IOUT6,6004) VGASS,ICCNTR
      WRITE (IOUT6,6024) PGAS,ICCNTR
6004  FORMAT (' NEW 1ST VALUE      ',F11.3,' FROM UNIT', I4)
6024  FORMAT (' NEW VALUE FOR PGAS ',F11.3,' FROM UNIT', I4)
      IF (VGASS.LT. 0.000) NATCON=.TRUE.
      IF (VGASS.GE. 0.000) NATCON=.FALSE.
      GOTC 100
C
499   IRC=499
      WRITE (IOUT6,6499) ICCNTR,IRC
6499  FORMAT (' +++++ ERROR: END/ERR-CONDITION FULLFILLED DURING',/
* ' ATTEMPT TO READ VGAS/PGAS FROM UNIT ',I4,/.
* ' +++++ CONTRL: IRC WAS ',I4,' CONTRL RETURNS TO MAIN')
      RETURN
C
C
C *CPTIGN*
500  CALL SUBOPT
      GOTC 100
C
C
C *SETTIM*
550  CALL SUBSET
      GOTC 100
C
C
C *STQTIM*
600  CALL SUBSTC
      GOTC 100

```

```

C
C
C *RCLTIM*
650  CALL SUBRCL
      GOTC 100
C
C
C *RUNSIM*
C
C *** TIMESTEP, NUMBER OF STEPS AND PRINTCONTROLNUMBER FOR THE
C *** SIMULATION ROUTINE ARE READ AND THE SIMULATION ROUTINE
C *** IS CALLED
C
700  IRC=799
      READ( INP5,*,END=799,ERR=799) DELTAT,NUMB,IPRINT
      WRITE (ICUT6,6009) DELTAT,NUMB
6009  FORMAT (' DELTA T = ',F10.3,/,
*           ' MAXIMUM NUMBER OF CYCLES ',I5)
      CALL RUNP(DELTAT,NUMB,JRC,IPRINT)
      IRC=JRC
      GOTC 100
C
799  WRITE( ICUT6,6799)
6799  FORMAT (' +++++ ERROR: END/ERR-CONDITION FULLFILLED DURING',/,
F ' ATTEMPT TO READ PARAMETERS FOR RUNP ',/,
F ' +++++ CONTRL RETURNS TO MAIN ')
      RETURN
C
C
C
C *CALLIO*
C
C *** THE IO-CONTROLROUTINE IS CALLED
C
800  CALL IOCGN
      GOTC 100
C
C
C *CABEND*
C
C *** A DUMP OF ALL COMMONAREAS IS REQUESTED
C
820  CALL ABEND (0)
      GOTC 100
C
C
C *CALLEX*
C
C *** TERMINATION OF THE PROGRAM IS REQUESTED; CONTRL RETURNS TO MAIN
C
900  IRC=0
      RETURN
      END
C
C
C
C
      SUBROUTINE VFUNC
C
C *** IN SUBROUTINE VFUNC THE MASS TRANSFER COEFFICIENT
C *** IS CALCULATED USING RELATIONS GIVEN IN 'VDI-WAERMEATLAS'
C *** AND IN 'PADLOC'
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      LOGICAL*1 NATCON

```

```

DATA TCCORR/273.0D0/,PI /3.1414D0/
COMMON /GEOM/ DIAM,XLEN,ROHRA,AREA4
REAL*4 AREA4
COMMON /IO/ INP5,IOU6,ILEVEL,IOU10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
COMMON /UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPH(100),THETA(100),
* ALPHA(100),CBETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),HCDEF(100),
* PGAS,AZ,TTIME,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON

C
C
C *** STATEMENT FUNCTION FOR CALCULATION OF DIFFUSION IN HE
C *** (THIS RELATION IS TAKEN FROM 'PADLGC').
C
      DCS(TKG,PGASS)= 0.1682*((TKG/103)**1.65D0)*(23.83/PGASS)* DSQRT
      F ((1/AZ+0.25)/0.257)

C
C
      IF (ILEVEL.GE.4) WRITE (IOU6,6000)
6000  FORMAT (' VFUNC>>>>> S.R. ENTERED')
      DO 200 I=2,IXMAX
      TKG=TEMPG(I)+TCCORR
      TGH=TEMPH(I)+TCCORR
      XMURHO=GDENS(TKG,PGAS)/GVISC(TKG,PGAS)
      DACT=DCS(TKG,PGAS)
      REY=VGAS(I)*XMURHO*PI/2.0D0*DIAM
      SC=1.0D0/XMURHO/DACT
      XKS18=0.037D0*DEXP(-0.2*DLOG(REY))
      XKGR=1.3D0*(TKG/TGH)**0.45D0
      HACT=DACT/(PI/2.0D0*DIAM)*XKS18*REY*SC*XKGR
      HCDEF(I)=HACT/(1.0D0+12.7D0*DSQRT(XKS18))*SC**0.666 -1.0D0)
200  CONTINUE
      IF (ILEVEL.GT.3) WRITE (IOU6,6001) HCDEF
6001  FORMAT(' H: ',10F7.2)
      RETURN
      END

C
C
C
      SUBROUTINE RUNP (DELTAT,NUMB,JRC,IPRINT)
C
C *** SUBROUTINE FOR SIMULATION OF PLATEOUT-BEHAVIOUR
C *** ITS USE IS RESTRICTED TO CESIUM.
C *** THE FLOW DIRECTION MAY BE CHANGED.
C *** MEANING OF PARAMETERS:
C
C *** DELTAT: STEPWIDTH IN TIME, MEASURED IN SECONDS
C
C *** NUMB : NUMBER OF TIMESTEPS
C
C *** JRC : RETURN CODE (OUTPUTPARAMETER ONLY)
C
C *** IPrint: SWITCH FOR OUTPUT TO STANDARD OUTPUT UNIT
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      EXTERNAL FTH
      DATA XMO /4.8D14/,TCCORR/273./
C
      XMO--> KAPPA*NUMBER OF (CS-)ATOMS PER MONOLAYER
C
      KAPPA IS THE RATIO BETWEEN REAL AND GEOMETRIC SURFACE
C
      TCCORR> TRANSFORMS CENTIGRADE TO KELVIN
      COMMON /IO/ INP5,IOU6,ILEVEL,IOU10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
      COMMON /GEOM/ DIAM,XLEN,ROHRA,AREA4
      REAL*4 AREA4
      COMMON /CALC/ AC(100),BC(100),ANGLD(100),THEGLD(100),SIGOLD(100)
      COMMON /FACT/ BANA,TENK,DELTT,I
      COMMON /OPTON/ STIM,QUPDN,QUPDT,QSTQ,QADD
      LOGICAL*1 NATCON,QERR1,QERR2,QPRINT,QUPDN,QUPDT,QSTQ,QADD

```

```

COMMON /UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),THETA(100),
* ALPHA(100),CBETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),HCOEF(100),
* PGAS,AZ,TTOT,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
DIMENSION EQUOUT(500),VTX(100)
EQUIVALENCE (EQUOUT(1),AN(1))

C
C *** SOME INITIALIZATIONS FOLLOW
C
DATA NTOT /0/,SURFAC/10280000.D0/

C
C THE FOLLOWING STATEMENTS TRANSFERS THE TIME STEP
C TO THE COMMON AREA FTACT
DELTT=DELTAT

C
C IF (ILEVEL.GE.4) WRITE (IOUT6,6000)
6000 FORMAT (' RUNP>>>> S.N. ENTERED ')
BETA=1-CBETA
DELTAX=XLEN/DFLOAT(IXSTEP)
NRACT= 0
QERR1=.FALSE.
QERR2=.FALSE.

C
C *** THE FOLLOWING STATEMENT DEPENDS ON THE COMPILER WHICH IS USED
C *** IT SUPPRESSES UNDERFLOW INTERRUPTS AND SHOULD NOT BE REMOVED.
C
CALL MASKE

C
C
C
C *** NRACT CONTAINS THE NUMBER OF THE ACTUAL STEP
C
50 NRACT=NRACT+1
QPRINT=.FALSE.
IF (MOD(NRACT,IPRINT) .EQ.0 .OR. NRACT .EQ.1
* .OR. NRACT .EQ. NUMB) QPRINT =.TRUE.
IF (ILEVEL .GE.1 .AND. QPRINT )
* WRITE(IOUT6,6001) NRACT,NUMB
6001 FORMAT ('1 CYCLE # ',I7,' OF ',I7,' CYCLES STARTED')
TTOT=TTOT+DELTAT
IF (QUPDT) CALL TADAPT
IF (QUPDN) CALL NADAPT
DO 40 ILV=2,IXMAX
40 VTX(ILV)=VGAS(ILV)*DELTAT/DELTAX
JRC=NUMB-NRACT

C
C
C *****
C * THE FOLLOWING PART OF THIS SUBROUTINE INTEGRATES THE CONVECTION *
C * EQUATION USING AN IMPLICIT DIFFERENCE SCHEME,AND AN ORDINARY *
C * DIFFERENTIAL EQUATION FOR THE CS-COVERAGE USING AN IMPLICIT *
C * EXPONENTIAL FITTING PROCEDURE. *
C *
C * IN CASE OF THE STANDARD FLOW DIRECTION THE INTEGRATION IS DONE IN*
C * THIS SUBROUTINE,IN THE CASE OF THE INVERSE FLOW DIRECTION THE *
C * INTEGRATION IS PERFORMED IN SUBROUTINE 'RUNNAT' USING THE SAME *
C * ALGORITHMS. THIS IS DONE IN ORDER TO TAKE THE BOUNDARY CONDITIONS*
C * PROPERLY INTO ACCOUNT. *
C *****
C
C
C *** IN CASE OF INVERSE FLOW CONVECTION (I.E. NATCON=.TRUE.),
C *** JUMP TO RUNNAT
C
IF (NATCON)

```

```

*      CALL RUNNAT(DELTA,X,JRC,VTX,QPRINT,8410)
C
C *** DEFF4--> RATIO BETWEEN PIPE SURFACE AND FREE GAS VOLUME
DEFF4=ROHRN*3.1416*DIAM/AREA4/10000.DG
C
C
C *** INITIALIZATION
C
C
DO 100 I=2,IXMAX
HILFC=DEFF4*HCOEF(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
DVDX =-(VGAS(I+1)-VGAS(I))/DELTA
AC(I)= (CSLAMB+DVDX+HILFC*ALPHA(I))*DELTAT
BC(I)=      HILFC*XMO      *DELTAT
C *** HILFC,AC,BC ARE SCRATCH VARIABLES
IF (ILEVEL .GE.5) WRITE(IOUT6,6002) I,AC(I),BC(I),HILFC
6002 FORMAT (' RUNP-I,AC,BC,HILFC:',I4,3D11.3)
100 CONTINUE
DO 200 I=2,IXMAX
ANOLD(I)=AN(I)
THEOLD(I)=THETA(I)
SIGOLD(I)=SIGMA(I)
200 CONTINUE
C *** ANOLD,THEOLD,SIGOLD ARE SAVEAREA FOR VALUES FROM LAST TIMESTEP
C
C *** NOW INTEGRATION STARTS
C
C *****
C * THE INTEGRATION IS PERFORMED IN THREE STEPS: *
C * IN 'STEP 1' THE CONCENTRATION AN IN THE CGCLING GAS IS UPDATED *
C *      USING THE OLD DESCRIPTION CONSTANT AND IMPLICITLY *
C *      THE NEW COVERAGE; *
C * IN 'STEP 2' COVERAGE AND DESORPTION CONSTANT ARE UPDATED. FIRST *
C * AN ITERATION PROCESS IS USED, AFTERWARDS THE VALUES *
C * ARE IMPROVED WITH THE IMSL-ROUTINE ZREAL, WHICH *
C * DETERMINES THE THE ZEROS OF A REAL FUNCTION; *
C * IN 'STEP 3' THE CONCENTRATION IS RECALCULATED WITH THE NEW *
C * DESORPTION CONSTANT. USING AN ITERATION PROCESS AND *
C * THE ZREAL-ROUTINE SELF-CONSISTENCY IS ACHIEVED. *
C *
C * IN CASE OF PROBLEMS THE LAST STEP IS RECALCULATED AND ALL VALUES*
C * ARE AUTOMATICALLY PRINTED TO STANDARD OUTPUT UNIT AND THE *
C * EXECUTION IS TERMINATED. *
C *****
C
DO 400 LAUF=1,IXSTEP
220 I=(IXMAX+1-LAUF)
C
C ***STEP 1***
C
C *** R IS THE CONSTANT USED FOR EXPONENTIAL FITTING PROCEDURE
C *** EXPRT AND CEXPRT ARE THE DERIVED WEIGHT FUNCTIONS
C *** BANA IS SCRATCHVARIABLE
C
TENK=TEMP(I)+TCRR
R= CSLAMB+(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THEOLD(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
BANA=BETA*ALPHA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
RDELT= ( R*DELTAT)
EXPRT= DEXP(-RDELT )
CEXPRT=DELTAT
IF (RDELT .GT. 1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
AN(I)=(ANOLD(I)+VTX(I)*AN(I+1)+BC(I)*THEOLD(I)*SIGOLD(I)*EXPRT)/
F (1D0+VTX(I)+AC(I))/
F (1D0- (BC(I)*THEOLD(I)*BANA*HCOEF(I)*CEXPRT/XMO)/
F (1+VTX(I)+AC(I)))

```

```

      IF (ILEVEL .GE.5) WRITE(IOUT6,6003) 1,R,EXPRT,AN(I)
6003  FORMAT(* STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I):*,I4,3D11.3 )
C
C
C ***STEP 2***
C
C
      DO 250 IST=1,4
      SIGMAI=SIGOLD(I)*EXPRT+BAHA*HCOEF(I)*CEXPRT*AN(I)/XMO
      XLIN1=DABS(SIGMAI-SIGMA(I))
      XLIN2=XLIN1/SIGMAI
      XLIN1=XLIN1/SIGMA(I)
      IF (XLIN1.LT.1D-3 .AND. XLIN2 .LT. 1D-3.AND. IST.GT.3) GOTO 251
      ULSIG=SIGMA(I) * (100+2D0/(DFLOAT(IST)+1D0))
      XLLSIG=SIGMA(I)/(100+2D0/(DFLOAT(IST)+1D0))
      SIGMA(I)=SIGMAI
      IF (SIGMAI.GT.ULSIG) SIGMA(I)=ULSIG
      IF (SIGMAI.LT.XLLSIG) SIGMA(I)=XLLSIG
      THETA(I)=1.31D11*TEMK*
      F DEXP((QADS-QSADS)/RGAS/TEMK*SIGMA(I)-QADS/RGAS/TEMK)
      R= CSLAMB+(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THETA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
      RDELT= ( R*DELTAT)
      EXPRT= DEXP(-RDELT )
      CEXPRT=DELTAT
      IF (RDELT .GT. .1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
      IF ( ILEVEL.GT.3) WRITE(IOUT6,*) IST,SIGMA(I),THETA (I)
250  CONTINUE
251  CONTINUE
      ITMAX=200
      IER=0
      SIGI=100D0*SIGMA(I)
      ZRESTP=1D-2*SIGOLD(I)
      ZRELIM=1D-6*SIGOLD(I)
      CALL ZREAL(FTH,ZRELIM,0.0D0,ZRESTP,11,1,SIGI,ITMAX,IER)
      SIGMA(I)=SIGI/100.0D0
      IF (ILEVEL .GE.5) WRITE(IOUT6,6004) 1,SIGMA(I),THETA(I),ITMAX
6004  FORMAT(* STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX :*, I4,2D11.3,I4)
      IF (IER.EC.0) GOTO 260
      JRC=IER
      GPRINT=.TRUE.
      IF(.NOT. QERR1)
      * WRITE (IOUT6,6007) IER,ITMAX,I
6007  FORMAT(* +++++ WARNING: NON-ZERO RETURN CODE FROM ZREAL *.215,
      * /, * +++++ WARNING: PRINTLEVEL CHANGED TO 5*,/,
      * * +++++ WARNING: PARAMETERS AN(I),SIGMA(I),THETA(I)*,
      * * RESTORED TO OLD VALUES*,/,
      * * +++++ WARNING: EXECUTION WILL BE TERMINATED AFTER*,
      * * RERUN OF THIS STEP,STEPNUMBER IS: *.215)
      IF (CERR1) CALL ABEND(7998)
      QERR1=.TRUE.
      ILEVEL=5
      AN(I)=ANOLD(I)
      SIGMA(I)=SIGOLD(I)
      THETA(I)=THEOLD(I)
      GOTO 220
C
C
C ***STEP 3***
C
C
260  DO 300 J=1,4
      R=CSLAMB+(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THETA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
      RDELT= ( R*DELTAT)
      EXPRT= DEXP(-RDELT )
      CEXPRT=DELTAT

```

```

IF (ROELT .GT. 1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
AN(I)=(ANOLD(I)+VTX(I)*AN(I+1)+BC(I)+THETA(I)*SIGMA(I))/
F (1D0+VTX(I)+AC(I))
ITMAX=175
IER=0
SIGI=100D0*SIGMA(I)
ZRESTP=1D-2*SIGOLD(I)
ZRELIM=1D-7*SIGOLD(I)
CALL ZREAL2(FTH,ZRELIM,0.0D0,ZRESTP,12,1,SIGI,ITMAX,IER)
SIGMAI=SIGI/100.0D0
XLIM1=DABS(SIGMAI-SIGMA(I))
XLIM2=XLIM1/SIGMAI
XLIM1=XLIM1/SIGMA(I)
IF (XLIM1.LT.1D-5 .AND. XLIM2 .LT. 1D-5.AND.J.GT.2) GOTO 400
IF (IER .EQ.0) GOTO 290
QPRINT=.TRUE.
IF (.NOT.QERR2 ) WRITE (IOUT6,6007) IER,ITMAX,I,J
IF (QERR2) CALL ABEND(7999)
QERR2 =.TRUE.
ILEVEL=5
AN(I)=ANOLD(I)
SIGMA(I)=SIGOLD(I)
THETA(I)=THEGLD(I)
GOTO 220
290 SIGMA(I)=SIGMAI
*IF (ILEVEL .GE.5)
* WRITE (IOUT6,6005) I,J,AN(I),SIGMA(I),THETA(I),ITMAX
6005 FORMAT(' STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX:',2I4,3D11.3,14)
300 CONTINUE
400 CONTINUE
C
C *** NOW ALL CONCENTRATIONS AND COVERAGES ARE UPDATED.
C *** LABEL '410' IS RETURN LABEL FOR SUBROUTINE RUNNAT.
C *** DEPENDING ON QPRINT THE NEW VALUES ARE PRINTED TO
C *** STANDARD OUTPUT MEDIUM.
C
410 CONTINUE
IF (.NOT. QPRINT ) GOTO 510
DO 500 I=2,IXMAX
WRITE (IOUT6,6006) AN(I),SIGMA(I),THETA(I),TEMPG(I),TEMPW(I),
* VGAS(I)
6006 FORMAT(' ', 3D11.3,3F8.1)
500 CONTINUE
C
C *** THE MOST RECENT RESULTS ARE COPIED TO RECORD IDWR OF UNIT 10
C *** RECORD 1 CONTAINS:LAST IDWR,NUMBER OF PROCESSED CYCLES AND
C *** ELAPSED REAL TIME IN SECONDS( INFORMATION MESSAGE IS GIVEN).
C
510 IDWR=IDWR+1
NTOT=NTOT+1
IF (IDWR.GT.100) IDWR=3
WRITE (IOUT10,IDWR) TTOT,ECUCUT
WRITE(IOUT10*1) IDWR,NTOT,TTCT
WRITE(IOUT6,6008) IDWR,TTOT
6008 FORMAT(' IDWR',15,' =',F15.4,'SEC SUCCESSFULLY PROCESSED')
IF (.NOT. QPRINT) GOTO 998
ALSU=0.000
DO 600 IRU=2,IXMAX
600 ALSU=ALSU+SIGMA(IRU)
ALSU=SURFAC*ALSU/DFLCAT(IXSTEP)*XMO
WRITE(IOUT6,6009) ALSU
6009 FORMAT(' THERE ARE ', D11.4,' ATOMS ADSORBED')
IF (NATCON) GOTO 630
ANCUT=AN(3)*VGAS(2)*AREA4*10000.D0
GOTC 640

```

KFA JULICH ZAM


```

6002 FORMAT (' RUNNAT=1,AC,BC,HILFC:',I4,3D11.3)
100 CONTINUE
DO 200 I=2,IXMAX
  ANCLD(I)=AN(I)
  THEOLD(I)=THETA(I)
  SIGOLD(I)=SIGMA(I)
200 CONTINUE
C *** ANOLD,THEOLD,SIGOLD ARE SAVEAREA FOR VALUES FROM LAST TIMESTEP
C
C *** NOW INTEGRATION STARTS
DO 400 LAUF=2,IXMAX
220 I=LAUF
C
C ***STEP 1***
C
C *** R IS THE CONSTANT USED FOR EXPONENTIAL FITTING PROCEDURE
C *** EXPRT AND CEXPRT ARE THE DERIVED WEIGHT FUNCTIONS
C *** BAHAI IS SCRATCHVARIABLE
C
  TENK=TEMPW(I)+TCGR
  R= CSLAMB*(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THEOLD(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
  BAHAI=BETA*ALPHA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
  RDELTA= ( R*DELTAT)
  EXPRT= DEXP(-RDELTA)
  CEXPRT=DELTAT
  IF (RDELTA .GT. 1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
  AN(I)=(ANOLD(I)+VTX(I)*AN(I-1)+BC(I)*THEOLD(I)*SIGOLD(I)*EXPRT)/
  F (1D0+VTX(I)+AC(I))/
  F (1D0- (BC(I)*THEOLD(I)*BAHAI*HCOEF(I)*CEXPRT/XM0)/
  F (1+VTX(I)+AC(I)))
  IF (ILEVEL .GE.5) WRITE(IOUT6,6003) I,R,EXPRT,AN(I)
6003 FORMAT (' STEP1-NR,R,EXPRT,AN(I):',I4,3D11.3)
C
C
C ***STEP 2***
C
C
DO 250 IST=1,4
  SIGMAI=SIGOLD(I)*EXPRT+BAHAI*HCOEF(I)*CEXPRT*AN(I)/XM0
  XLIM1=DABS(SIGMAI-SIGMA(I))
  XLIM2=XLIM1/SIGMAI
  XLIM1=XLIM1/SIGMA(I)
  IF (XLIM1.LT.1D-3 .AND. XLIM2 .LT. 1D-3.AND. IST.GT.3) GOTO 251
  ULSIG=SIGMA(I) *((1D0+2D0/(DPLGAT(IST)+1D0))
  XLLSIG=SIGMA(I)/((1D0+2D0/(DPLGAT(IST)+1D0))
  SIGMA(I)=SIGMAI
  IF (SIGMAI.GT.ULSIG) SIGMA(I)=ULSIG
  IF (SIGMAI.LT.XLLSIG) SIGMA(I)=XLLSIG
  THETA(I)=1.31D11*TEMK
  F DEXP((QADS-QSADS)/RGAS/TEMK*SIGMA(I)-QADS/RGAS/TEMK)
  R= CSLAMB*(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THETA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
  RDELTA= ( R*DELTAT)
  EXPRT= DEXP(-RDELTA)
  CEXPRT=DELTAT
  IF (RDELTA .GT. 1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
  IF ( ILEVEL.GT.3) WRITE(IOUT6,*) IST,SIGMA(I),THETA (I)
250 CONTINUE
251 CONTINUE
ITMAX=200
IER=0
SIGI=100D0*SIGMA(I)
ZRESTP=1D-2*SIGOLD(I)
ZRELIM=1D-6*SIGOLD(I)
CALL ZREAL1(FTM,ZRELIM,0.0D0,ZRESTP,11,1,SIGI,ITMAX,IER)
SIGMA(I)=SIGI/100.0D0

```

```

        IF (ILEVEL .GE.5) WRITE(IOUT6,6004) I,SIGMA(I),THETA(I),ITMAX
6004  FORMAT(' STEP2-I,SIGMA,THETA,ITMAX :', I4,2D11.3,I4)
        IF (IER.EQ.0) GOTO 260
        JRC=IER
        IF(.NOT. QERR1)
        * WRITE (IOUT6,6007) IER,ITMAX,I
6007  FORMAT(' +++++ WARNING: NON-ZERO RETURN CODE FROM ZREAL ',2I5,
        * /, ' +++++ WARNING: PRINTLEVEL CHANGED TO 5',/,
        * ' +++++ WARNING: PARAMETERS AN(I),SIGMA(I),THETA(I)',
        * ' RESTORED TO OLD VALUES',/,
        * ' +++++ WARNING: EXECUTION WILL BE TERMINATED AFTER',
        * ' RERUN OF THIS STEP,STEPNUMBER IS: ',2I5)
        IF (QERR1) CALL ABEND(6998)
        QERR1=.TRUE.
        ILEVEL=5
        AN(I)=ANOLD(I)
        SIGMA(I)=SIGOLD(I)
        THETA(I)=THEOLD(I)
        GOTO 220
C
C
C ***STEP 3***
C
C
260  DO 300 J=1,4
        R=CSLAMB*(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THETA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
        RDELTA= ( R*DELTAT)
        EXPRT=DEXP(-RDELTA)
        CEXPRT=DELTAT
        IF (RDELTA .GT. 1D-6) CEXPRT=(1D0-EXPRT)/R
        AN(I)=(ANOLD(I)+VTX(I)*AN(I-1)+BC(I)*THETA(I)*SIGMA(I))/
        F (1D0+VTX(I)+AC(I))
        ITMAX=175
        IER=0
        SIGI=100D0*SIGMA(I)
        ZRESTP=1D-2*SIGOLD(I)
        ZRELIM=1D-7*SIGOLD(I)
        CALL ZREAL2(FTH,ZRELIM,0.0D0,ZRESTP,12,1,SIGI,ITMAX,IER)
        SIGMAI=SIGI/100.0D0
        XLIM1=DABS(SIGMAI-SIGMA(I))
        XLIM2=XLIM1/SIGMAI
        XLIM1=XLIM1/SIGMA(I)
        IF (XLIM1.LT.1D-5 .AND. XLIM2 .LT. 1D-5.AND.J.GT.2) GOTO 400
        IF (IER .EQ.0) GOTO 290
        IF (.NOT.QERR2 ) WRITE (IOUT6,6007) IER,ITMAX,I,J
        IF (QERR2) CALL ABEND(6999)
        QERR2 =.TRUE.
        ILEVEL=5
        AN(I)=ANOLD(I)
        SIGMA(I)=SIGOLD(I)
        THETA(I)=THEOLD(I)
        GOTO 220
290  SIGMA(I)=SIGMAI
        IF (ILEVEL .GE.5)
        * WRITE (IOUT6,6005) I,J,AN(I),SIGMA(I),THETA(I),ITMAX
6005  FORMAT(' STEP3-I,J,AN,SIGMA,THETA,ITMAX:',2I4,3D11.3,I4)
300  CONTINUE
400  CONTINUE
        RETURN 1
        END
C
C
C
C
C

```

```

C
      DOUBLE PRECISION FUNCTION FTH(SIG)
C
C *** THIS FUNCTION IS USED FOR THE ZREAL-SUBROUTINES IN RUNP/RUNNAT
C *** (CALCULATION OF COVERAGE/DESCRIPTION-CONSISTENCY)
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DATA XMO, /4.8D14/
C
      XMO -> KAPPA*NUMBER OF (CS-)ATOMS PER MGNCLAYER
C
      KAPPA IS THE RATIO BETWEEN REAL AND GEOMETRIC SURFACE
C
      TCORR -> TRANSFORMS CENTIGRADE TO KELVIN
C
      COMMON /IO/ INPS, IOUT6, ILEVEL, IOUT10, IDWR, IDWR0, INPT, INPN
      COMMON /GEOM/ DIAM, XLEN, ROHRN, AREA4
      REAL*4 AREA4
      COMMON /CALC/ AC(100), BC(100), ANOLD(100), THEOLD(100), SIGOLD(100)
      COMMON /FACT/ BAHA, TEMK, DELTAT, I
      LOGICAL*1 NATCGN
      COMMON /UNIV/ AN(100), SIGMA(100), TEMPG(100), TEMPN(100), THETA(100),
      * ALPHA(100), CBETA, RGAS, QADS, CSADS, CSLAMB, VGAS(100), HCOEF(100),
      * PGAS, AZ, TTIME, IXSTEP, IXMAX, ITSTEP, NATCGN
      SIGI = SIG/100D0
      THETA(I) = 1.31D11*TEMK*
      F = DEXP((QADS-QSADS)/RGAS/TEMK*SIGI-QADS/RGAS/TEMK)
      R = CSLAMB*(HCOEF(I)+CBETA*ALPHA(I))*THETA(I)/(HCOEF(I)+ALPHA(I))
      RDELTA = (R*DELTAT)
      EXPRT = DEXP(-RDELTA)
      CEXPRT = DELTAT
      IF (RDELTA .GT. 1D-6) CEXPRT = (1D0-EXPRT)/R
      FTH = SIGOLD(I)*EXPRT + BAHA*HCOEF(I)*CEXPRT*AN(I)/XMO-SIGI
      IF (ILEVEL .GE. 5)
      * WRITE( IOUT6, 6000) I, SIGI, THETA(I), FTH
6000  FORMAT(' ZREAL>>>: I, SIGI, THETA(I), FTH: ', I4, 3D12.4 )
      RETURN
      END
C
C
C
C
C
C
      SUBROUTINE ABEND(IABEND)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C
C *** THIS SUBROUTINE DUMPS ALL COMMON AREA AND TERMINATES EXECUTION
C *** (EXCEPT IABEND=0)
C
      COMMON /IO/ INPS, IOUT6, ILEVEL, IOUT10, IDWR, IDWR0, INPT, INPN
      COMMON /GEOM/ DIAM, XLEN, ROHRN, AREA4
      REAL*4 AREA4
      COMMON /CALC/ AC(100), BC(100), ANOLD(100), THEOLD(100), SIGOLD(100)
      COMMON /FACT/ BAHA, TEMK, DELTT, I
      LOGICAL*1 NATCGN, QERR1, QERR2
      COMMON /UNIV/ AN(100), SIGMA(100), TEMPG(100), TEMPN(100), THETA(100),
      * ALPHA(100), CBETA, RGAS, QADS, CSADS, CSLAMB, VGAS(100), HCOEF(100),
      * PGAS, AZ, TTIME, IXSTEP, IXMAX, ITSTEP, NATCGN
C
C
      WRITE (IOUT6, 6000) INPS, IOUT6, ILEVEL, IOUT10, IDWR, IDWR0, INPT, INPN
6000  FORMAT ('I +ABEND+ IC CONTAINS: ', 8I6)
      WRITE (IOUT6, 6001) DIAM, XLEN, ROHRN, AREA4
6001  FORMAT ('O +ABEND+ GEOM CONTAINS: ', 4D15.8)
      WRITE (IOUT6, 6002)
6002  FORMAT ('O +ABEND+ CALC CONTAINS: ')
      WRITE (IOUT6, 6006) AC, BC, ANOLD, THEOLD, SIGOLD
      WRITE (IOUT6, 6003) BAHA, TEMK, DELTT, I

```

```

6003 FORMAT ('0 +ABEND+ FFACT CONTAINS: ',3D15.8,15)
      WRITE (ICUT6,6004)
6004 FORMAT ('0 +ABEND+ UNIV CONTAINS: ')
      WRITE (ICUT6,6006) AN,SIGMA,TEMPG,TEMPW,THETA,ALPHA,CBETA,RGAS,
      * QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS,HCDEF,PGAS,AZ,TTIME
      WRITE(ICUT6,*) IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      WRITE(ICUT6,6005) IABEND
6005 FORMAT ('0 +ABEND+ ABEND WAS CALLED WITH CODE ',18)
      IF ( IABEND .NE. 0 ) CALL CCODE(IABEND)
      RETURN
6006 FORMAT(1X,5D15.8)
      END

C
C
C *** THIS SUBROUTINE READS THE DATA WHICH ARE NEEDED FOR A RESTART
C
      SUBROUTINE RSTART(*)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION EQUIN(500)
      EQUIVALENCE (EQUIN(1),AN(1))
      COMMON /IU/ INPS,ICUT6,ILEVEL,ICUT10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
      COMMON/UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),
      * THETA(100),ALPHA(100),CBETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),
      * HCDEF(100),PGAS,AZ,TTOT,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      LOGICAL*1 NATCON

C
C
C *** FROM THE FIRST RECORD OF THE DIRECT ACCESS UNIT THE STARTTIME
C *** TTOT AND THE NUMBER OF THE LAST INFORMATIONRECORD (IDWR) IS TAKEN
C
      READ(ICUT10*1) IDWR,NTOT,TTOT

C
C
C *** RSTART READS FROM RECORD IDWR OF THE DA-UNIT (ICUT10) THE VALUES
C *** OF AN,SIGMA,TEMPG AND TEMPW.
C
      READ(ICUT10*IDWR) TTOT,EQUIN

C
C
C *** PRINT OF CONTROLINFORMATION TO STANDARD OUTPUT UNIT AND RETURN
C *** TO CALLING PROGRAM
C
      WRITE(ICUT6,6000) IDWR,ICUT10,TTOT
6000 FORMAT('0 AREAS AN,SIGMA,TEMPG,TEMPW AND THETA RESTORED FROM',
      F * RECORD NR.',15,' OF UNIT ',14,/,
      F * REAL TIME WAS ',F15.5,' SEC')
      RETURN 1
      END

C
C
C *****
C *** SUBROUTINE TADAP IS USED TO ADAPT THE VALUES OF THE **
C *** TEMPERATURES, WHICH ARE CALCULATED ELSEWHERE (OFFLINE).**
C *** TO THE SPACE AND TIME SCHEME OF THIS PROGRAM. **
C *** THE FIRST CALL MUST USE THE ENTRY TADAPO, ALL FURTHER **
C *** CALLS SHOULD BE DONE VIA THE TADAPT-ENTRYPOINT. **
C *****

C
C
      SUBROUTINE TADAP
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      REAL*4 TIME4,VHE4,TEG4,TEW4,ARK4

```

```

DIMENSION VGEL(100),VGEH(100),TEGL(100),TEGH(100),TEWL(100),
* TEWH(100),VGEA(100),TEGA(100),TEWA(100)
LOGICAL*1 NATCON
COMMON /I0/ INP5,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
COMMON/UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),
* THETA(100),ALPHA(100),CBETA,RGAS,GADS,CSADS,CSLAMB,VGAS(100),
* HCDEF(100),PGAS,AZ,TTOT,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
COMMON /ADAPT/ VGEL,VGEH,TEGL,TEGH,TEWL,TEWH,VGEA,TEGA,TEWA,
* DELTE,DELTE1,DELTXR,TIMEL,TIMEH
C
C
C *** TADAP0 IS THE ENTRYPOINT FOR THE FIRST CALL TO TADAP
C
C
C     ENTRY TADAP0
C
C
C *** TRAPS SUPPRESSES SYSTEMINTERUPTS DUE TO EXPONENT-UNDERFLOW
C
C
C     CALL MASKE
C
C
C *** INPUT OF THE FIRST ITSTEP INFORMATION RECORDS FROM TAPE
C
C
C     DO 100 I=1,ITSTEP
C     READ(INPT) TIME4,J4,ARK4,VHE4,TEG4,TEW4
C     VGEL(I)=VHE4
C     TEGL(I)=TEG4
C     TEWL(I)=TEW4
100  CONTINUE
C     TIMEL=TIME4
C     IF (ILEVEL.GE.4) WRITE(ICUT6,6001) TIMEL
C
C
C *** INPUT OF THE NEXT ITSTEP INFORMATION RECORDS
C
C
C     120  CONTINUE
C     DO 200 I=1,ITSTEP
C     121  CONTINUE
C     READ(INPT,END=121) TIME4,J4,ARK4,VHE4,TEG4,TEW4
C     VGEH(I)=VHE4
C     TEGH(I)=TEG4
C     TEWH(I)=TEW4
C     200  CONTINUE
C     TIMEH=TIME4
C     IF (ILEVEL.GE.4)WRITE(ICUT6,6001) TIMEH
6001  FORMAT(' TADAP: TIME ON TAPE WAS: ',F15.3)
C
C
C *** ENTRYPOINT FOR UPDATE OF TEMPERATURES
C
C
C     ENTRY TADAPT
C
C
C *** IF THE ACTUAL TIME TTOT IS LOWER THAN THE TIME GIVEN IN THE
C *** SECOND LAST RECORD GROUP, THE PROGRAM TERMINATES AFTER A
C *** STORAGE DUMP.
C
C
C     IF (TTOT .LT. TIMEL) CALL ABEND (2525)
C
C
C

```

```

C *** IF THE ACTUAL TIME TTOT IS ENCLOSED BETWEEN TIMEH,THE
C *** EXECUTION OF PROGRAM IS CONTINUED AT LABEL '400' .
C
C
C     IF (TTOT .LE. TIMEH) GOTO 400
C
C *** IF TTOT IS NOT YET FOUND ON TAPE. THE NEXT RECORDS ARE READ
C
C     DO 300 I=1,ITSTEP
C       VGEH(I)=VGEH(I)
C       TEGH(I)=TEGH(I)
C       TEWH(I)=TEWH(I)
300   CONTINUE
C     IF (ILEVEL. GE.4 ) WRITE(ICUT6,6002) TIMEH,TIMEH,TTOT
C     TIMEH=TIMEH
6002  FORMAT(' TADAP:TIMES NOT OK.: TIMEH,TIMEH,TTOT ',3F15.3)
C     GOTO 120
C
C
C *** IF TTOT IS FOUND. TIME-INTERPOLATION IS DONE
C
C     400   CONTINUE
C     WRITE(ICUT6,6000) TIMEH,TTOT,TIMEH
6000  FORMAT(' TADAP: TIMEH,TTOT,TIMEH (IN SEC.): ',3F15.3)
C
C
C     DELTE=TIMEH-TIMEH
C     DELTEI=TTOT-TIMEH
C     DELTR=DELTEI/DELTE
C     IF (ILEVEL.GE.5) WRITE(ICUT6,*) DELTE,DELTEI,DELTR
C     DO 500 I=1,ITSTEP
C
C *** LINEAR (TIME-)INTERPOLATION IS DONE
C
C     VGEA(I)=VGEH(I)+DELTR*(VGEH(I)-VGEH(I))
C     TEGA(I)=TEGH(I)+DELTR*(TEGH(I)-TEGL(I))
C     TENA(I)=TEWH(I)+DELTR*(TEWH(I)-TEWL(I))
C     IF (ILEVEL. GE.4)
C       * WRITE(ICUT6,6005) VGEH(I),VGEA(I),VGEH(I),TEGL(I),
C       * TEGA(I),TEGH(I),TEWL(I),TENA(I),TEWH(I)
6005  FORMAT(' VGE,TEG,TEN;L.A.H:',3F15.2,/,1X,3F15.2,/,1X,3F15.2)
C     500   CONTINUE
C
C *** NOW THE SPACE-INTERPOLATION WILL BE PERFORMED
C
C     DELTXR=DFLOAT(ITSTEP - 1)/DFLOAT(IXSTEP-1)
C
C *** LOWER BOUND VALUES
C
C     TEMPG(2)=TEGA(1)
C     VGAS(2) =VGEA(1)+100.000
C     TEMPN(2)=TENA(1)
C     VGAS(1) =VGAS(2)
C
C *** UPPER BOUND VALUES
C
C     TEMPG(IXMAX) =TEGA(ITSTEP)
C     VGAS (IXMAX) =VGEA(ITSTEP)+100.000
C     TEMPN(IXMAX) =TENA(ITSTEP)
C     VGAS(IXMAX+1)=VGAS(IXMAX)
C
C *** INTERMEDIATE VALUES(FOUND BY LINEAR INTERPOLATION)
C

```

```

      DO 600 I=3,IXSTEP
C *** RLADR> REAL LOW ADDRESS
      RLADR=DELTXR*DFLGAT(I-2)+100
C *** ILADR> INTEGER LOW ADDRESS
      ILADR=RLADR
C *** IHADR> INTEGER HIGH ADDRESS
      IHADR=RLADR+100
C *** INTERPOLATION FORMULAS
      TEMPG(I)=TEGA(ILADR)+DELTXR*(RLADR-DFLGAT(ILADR))*
*               (TEGA(IHADR)-TEGA(ILADR))
      TEMPW(I)=TEWA(ILADR)+DELTXR*(RLADR-DFLGAT(ILADR))*
*               (TEWA(IHADR)-TEWA(ILADR))
      VGAS(I)=VGEA(ILADR)+DELTXR*(RLADR-DFLGAT(ILADR))*
*               (VGEA(IHADR)-VGEA(ILADR))
      VGAS(I)=VGAS(I)*100.000
      IF (ILEVEL.GE.4) WRITE(10UT6,6004) I,ILADR,RLADR,IHADR
6004  FORMAT(' TADAP:',ILADR,RLADR,IHADR',2I5,F10.2,I5)
600   CONTINUE
      CALL VFUNC
      RETURN
      END

C
C
C *****
C *** SUBROUTINE NADAP IS USED TO ADAPT THE CONCENTRATION OF **
C *** INCOMING ATOMS, WHICH IS CALCULATED ELSEWHERE **
C *** (OFFLINE) TO THE TIME SCHEME OF THIS PROGRAM. **
C *** THE FIRST CALL MUST USE THE ENTRY NADAP0, ALL FURTHER **
C *** CALLS SHOULD BE DONE VIA THE NADAPT-ENTRYPOINT. **
C *****
C
C
C
      SUBROUTINE NADAP
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION VGEL(100),VGEN(100),TEGL(100),TEGH(100),TEWL(100),
*   TEWH(100),VGEA(100),TEGA(100),TEWA(100)
      LOGICAL*1 NATCON,QUPUN,QUPDT,QSTU,QADD
      REAL*4 AREA4
      COMMON /OPTON/ STTIM,QUPDN,QUPDT,QSTU,QADD
      COMMON /IO/ INP5,IOUT6,ILEVEL,IOUT10,IDWR,IDWR0,INPT,INPN
      COMMON/UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPW(100),
*   THETA(100),ALPHA(100),CBETA,PGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),
*   HCCEF(100),PGAS,AZ,TTOT,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      DATA AREA/0.000/

C
C
C *** NADAP0 IS THE ENTRYPOINT FOR THE FIRST CALL TO NADAP
C
C
      ENTRY NADAP0(AREA4)
      AREA=AREA4

C
C
C *** MASKE SUPPRESSES SYSTEM-INTERRUPTS DUE TO EXPONENT-UNDERFLOW
C
C
      CALL MASKE

C
C
C *** INPT OF THE FIRST INFORMATION RECORD FROM TAPE
C
      READ(INPN) TIMEL,FRCL,FRCOL
      IF (ILEVEL.GE.4) WRITE(10UT6,6001) TIMEL
C

```

```

C
C *** INPUT OF THE NEXT INFORMATION RECORD
C
C
120  CONTINUE
      READ(INPN,END=120) TIMEH,FRCUH,FRCOH
      IF (ILEVEL.GE.4)WRITE(1OUT6,6001) TIMEH
6001  FORMAT(' NADAP: TIME ON TAPE WAS: ',F15.3)
C
C
C *** ENTRYPOINT FOR UPDATE OF TEMPERATURES
C
      ENTRY NADAPT
C
C
C *** IF THE ACTUAL TIME TTOT IS LOWER THAN THE TIME GIVEN IN THE
C *** SECOND LAST RECORD GROUP, THE PROGRAM TERMINATES AFTER A
C *** STORAGE DUMP.
C
      IF (TTOT .LT. TIMEH) CALL ABEND (2524)
C
C
C *** IF THE ACTUAL TIME TTOT IS ENCLOSED BETWEEN TIMEH AND TIMEH,THE
C *** EXECUTION OF PROGRAM IS CONTINUED AT LABEL '400' .
C
      IF (TTOT .LE. TIMEH) GOTC 400
C
C *** IF TTOT IS NOT YET FOUND ON TAPE, THE NEXT RECORDS ARE READ
C
      FRCUL=FRCUH
      FRCCL=FRCOH
300  CONTINUE
      IF (ILEVEL. GE.4 ) WRITE(1OUT6,6002) TIMEH,TIMEH,TTOT
      TIMEH=TIMEH
6002  FORMAT(' NADAP:TIMES NOT OK.: TIMEH,TIMEH,TTOT ',3F15.3)
      GOTC 120
C
C
C *** IF TTOT IS FOUND, TIME-INTERPOLATION IS DONE
C
400  CONTINUE
      WRITE(1OUT6,6000) TIMEH,TTOT,TIMEH
6000  FORMAT(' NADAP: TIMEH,TTOT,TIMEH (IN SEC.): ',3F15.3)
C
C
      DELTE=TIMEH-TIMEH
      DELTEI=TTOT-TIMEH
      DELTR=DELTEI/DELTE
      IF (ILEVEL.GE.4) WRITE(1OUT6,*) DELTE,DELTEI,DELTR
C
C *** LINEAR (TIME-)INTERPOLATION IS DONE
C
      AN(IXMAX+1)=FRCUL+DELTR*(FRCUH-FRCUL)
      AN( 1)=FRCCL+DELTR*(FRCOH-FRCCL)
      IF (ILEVEL. GE.4)
      * WRITE(1OUT6,6005) FRCUL,AN(IXMAX+1),FRCUH,FRCCL,AN(1),FRCOH
6005  FORMAT(' FRCU,FRCL:L.A.H:',3D15.8,/,1X,3D15.8)
C
C *** NOW THE INLET CONCENTRATION IS CALCULATED FROM THE
C *** INLET FLUX. IF 'QADD=.TRUE.' THE FLUXES FROM THE UPPER AND
C *** LOWER PLENUM ARE ADDED.
C

```



```

        IF(.NOT. QADD) GOTG 500
        AN(1)=AN(1)+AN(IXMAX+1)
        AN(IXMAX+1)=AN(1)
        WRITE(IOUT6,6006) AN(1)
6006  FORMAT(' +++++ ATTENTION: QADD-OPTION IN EFFECT ',
        * /,' +++++ INLET FLUX CHANGED TO ',D15.8)
C
C
500  AN(1)=AN(1)/VGAS(2)/AREA/10000.000
        AN(IXMAX+1)=AN(IXMAX+1)/VGAS(IXMAX)/AREA/10000.00
        IF (ILEVEL.GE.0) WRITE (IOUT6,6007) AN(1),AN(IXMAX+1)
6007  FORMAT(1X,'NADAP: AN(1),AN(IXMAX+1) THIS STEP: ',2D15.8)
C
C
C
        RETURN
        END
C
C
C
SUBROUTINE SUBOPT
IMPLICIT REAL*8 (A-H,G-P,R-Z),LOGICAL*1 (C)
COMMON /IO/ INPS,ICUT6,ILEVEL,IOUT10,IOH,IOHRO,INPT,INPN
COMMON /OPTCN/ STIM,QUPDN,QUPDT,QSTG,QADD
REAL*8 NUPDAT,NNOUPD,NOPNCP
DATA NUPDAT/'$NUPDAT$'/,TUPDAT/'$TUPDAT$'/,NNOUPD/'$NNOUPD$'/,
* TNOUPD/'$TNOUPD$'/,ENDCPT/'$ENDCPT$'/,NOPNCP/'$NOPNCP$'/,
* ADDFP/'$ADDFP $'/,ADDREL/'$ADDREL$'/
C
C
100  READ(INPS,5000) ATEXT
5000  FORMAT(A8)
        WRITE(IOUT6,6000) ATEXT
6000  FORMAT(' OPTION REQUESTED: ',A8)
C
C 'DISTRIBUTION BOX'
        IF(ATEXT .EQ.NOPNCP) GOTG 200
        IF(ATEXT .EQ.ENDCPT) GOTG 250
        IF(ATEXT .EQ.NUPDAT) GOTG 300
        IF(ATEXT .EQ.NNOUPD) GOTG 400
        IF(ATEXT .EQ.TUPDAT) GOTG 500
        IF(ATEXT .EQ.TNOUPD) GOTG 600
        IF(ATEXT .EQ.ADDFP ) GOTG 700
        IF(ATEXT .EQ.ADDREL) GOTG 750
        WRITE (IOUT6,6001) ATEXT
6001  FORMAT(' +++++ ERROR: UNKNOWN OPTION: ',A8,' ,OPTION IGNORED')
        GOTG 100
C *NOPNCP*    NG-OPERATION
200  GOTG 100
C
C *ENDCPT*    LAST OPTION INPUT
250  RETURN
C
C *NUPDAT*    CONCENTRATION WILL BE UPDATED
300  IF (QSTG) GOTG 501
        QUPDN=.TRUE.
        GOTG 100
C
C *NNOUPD*    CONCENTRATION WILL BE FIXED
400  QUPCN=.FALSE.
        GOTG 100
C
C *TUPDAT*    TEMPERATURES/VELOCITIES WILL BE UPDATED
500  IF(QSTG) GOTG 501
        QUPDT=.TRUE.

```

```

      GOTO 100
501  WRITE(IOUT6,6002)
6002  FORMAT(' ***** ERROR: A NUPDAT/TUPDAT-REQUEST IS NOT POSSIBLE',
      * /1X,'AFTER A STOTIM-REQUEST OR MUST BE PRECEDED ',
      * 'BY A RCLTIM-REQUEST.',/1X,' OPTION IGNORED')
      GOTO 100
C
C
C *TNCUPD*      TEMPERATURES/VELOCITIES WILL BE FIXED
600  CUPDT=.FALSE.
      GOTO 100
C
C
C *ADDFP*      THE FISSION PRODUCTS FROM LOWER AND UPPER PLENUM ARE ADDED
700  CADD=.TRUE.
      GOTO 100
C
C
C *ADDEL*      THE FISSION PRODUCTS FROM LOWER AND UPPER PLENUM ARE NOT
C              ADDED
750  CADD=.FALSE.
      GOTO 100
C
C
C              END
C
C
C              SUBROUTINE SUBSET
C
C
C *** THE SUBROUTINE IS USED TO CHANGE THE ACTUAL TIME TO A GIVEN
C *** VALUE. THE USER SHOULD PAY ATTENTION TO THE FACT THAT PROBLEMS
C *** WITH THE NADAP/TADAP-SUBROUTINES OCCUR, IF THE TIME IS SWITCHED
C *** BACK IN SUCH A WAY, THAT DATASETS MUST BE REWCUND.
C
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION EQUIC(500)
      COMMON /IO/ INP5,IOUT6,ILEVEL,ICUT10,IDWR,IDWRO,INPT,INPN
      COMMON /OPTCN/ STTIM,CUPDN,CUPDT,QSTG,CADD
      COMMON/UNIV/ AN(100),SIGMA(100),TEMPG(100),TEMPN(100),
      * THETA(100),ALPHA(100),CEETA,RGAS,QADS,QSADS,CSLAMB,VGAS(100),
      * HCOEF(100),PGAS,AZ,TTOT,IXSTEP,IXMAX,ITSTEP,NATCON
      LOGICAL*1 CUPDN,CUPDT,QSTG,NATCCN,CADD
      EQUIVALENCE (EQUIC(1),AN(1))
      IF (CUPDN .OR. CUPDT) GOTO 9998
      READ (INP5,*) TIMENW
      READ(IOUT10*1) IDWR,NTGT,TTGT
      READ(ICUT10*IDWR) TTGT,EQUIC
      TTGT=TIMENW
      IDWR=IDWR+1
      IF (IDWR .GT.100) IDWR=3
      WRITE(IOUT10*IDWR) TTGT,EQUIC
      WRITE(IOUT10*1) IDWR,NTGT,TTGT
      WRITE(IOUT6,6000) IDWR,TTGT
6000  FORMAT(' IDWR ',15,' :ACTUAL TIME SUCCESSFULLY SET TO ',5X,
      * F15.4, ' SEC')
      RETURN
9998  WRITE(IOUT6,6001)
6001  FORMAT(' ***** ERROR: A SETTIM-REQUEST MUST BE PRECEDED BY',
      * /1X,' ANUPD AND TNCUPD-REQUESTS— EXECUTION TERMINATED '),
      CALL ABEND(1001)
      RETURN
      END

```

```

C
C
C
C      SUBROUTINE SUBSTC
C
C
C *** THE SUBROUTINE SUBSTC IS USED TO STORE THE ACTUAL TIME FOR USE
C *** IN A LATER STAGE OF THE CALCULATIONS. IN ORDER TO PREVENT
C *** PROBLEMS WITH NADAP/TADAP-SUBROUTINES, THE QUPDN/QUPDT FLAGS
C *** ARE SET TO '.FALSE.'
C
C
C      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C      COMMON /IO/ INP5, IOUT6, ILEVEL, IOUT10, IDWR, IDWRO, INPT, INPN
C      COMMON /CPTTGN/ STTIM, QUPDN, QUPDT, QSTG, QADD
C      COMMON /UNIV/ AN(100), SIGMA(100), TEMPG(100), TEMPW(100),
C      * THETA(100), ALPHA(100), CBETA, RGAS, QADS, CSAOS, CSLAMB, VGAS(100),
C      * HCEFF(100), PGAS, AZ, TTOT, IXSTEP, IXMAX, ITSTEP, NATCCN
C      LOGICAL*1 QUPDN, QUPDT, QSTG, NATCCN, QADD
C
C
C      IF (QUPDN .OR. QUPDT) WRITE(IOUT6,6000)
6000  FORMAT(' +++++ WARNING: NOUPDATE REQUESTS ISSUED')
      QUPDN=.FALSE.
      QUPDT=.FALSE.
      STTIM=TTOT
      WRITE(IOUT6,6001) STTIM
6001  FORMAT(' TIME STORED: ',F15.4,' SEC')
      QSTG=.TRUE.
      RETURN
      END
C
C
C      SUBROUTINE SUBRCL
C
C
C *** SUBROUTINE SUBRCL IS USED TO SET THE ACTUAL TIME BACK TO THE
C *** VALUE WHICH WAS STORED WITH SUBSTC. THE TEMPERATURES, VELOCITIES
C *** AND THE INLET CONCENTRATION MUST NOT BE CHANGED BETWEEN A CALL
C *** TO SUBSTC AND SUBRCL. IN ORDER TO PREVENT PROBLEMS WITH
C *** NADAP/TADAP-SUBROUTINES, A CALL TO THESE TWO SUBROUTINES MAY
C *** RESULT IN AN ERROR WITH ENTRY-CODE 2424 OR 2525 (AFTER THE
C *** RCLTIM-REQUEST).
C
C
C      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C      COMMON /IO/ INP5, IOUT6, ILEVEL, IOUT10, IDWR, IDWRO, INPT, INPN
C      COMMON /OPTTGN/ STTIM, QUPDN, QUPDT, QSTG, QADD
C      COMMON /UNIV/ AN(100), SIGMA(100), TEMPG(100), TEMPW(100),
C      * THETA(100), ALPHA(100), CBETA, RGAS, QADS, CSAOS, CSLAMB, VGAS(100),
C      * HCEFF(100), PGAS, AZ, TTOT, IXSTEP, IXMAX, ITSTEP, NATCCN
C      LOGICAL*1 QUPDN, QUPDT, QSTG, NATCCN, QADD
C      DIMENSION EQUIG(500)
C      EQUIVALENCE (EQUIG(1), AN(1))
C
C
C      IF (QSTG) GO TO 100
C      WRITE(IOUT6,6000)
6000  FORMAT(' +++++ ERROR: A RCLTIM-REQUEST MUST BE PRECEDED BY',/IX,
C      * ' A STOTIM-REQUEST --- EXECUTION TERMINATED')
      CALL ABEND(1002)
100   QSTG=.FALSE.
      TTOT=STTIM
      READ(IOUT10*1) IDWR, NTOT, T
      READ(IOUT10*IDWR) T, EQUIG

```

```

IDWR=IDWR+1
IF (IDWR.GT.100) IDWR=3
WRITE(IGOUT10*IDWR) STIM,EQUIC
WRITE(IGOUT10*1) IDWR,ATGT,STIM
WRITE(IGOUT6,6001) IDWR,STIM
6001 FORMAT(' IDWR ',15,' :ACTUAL TIME SUCCESSFULLY RESTORED TO ',
* F15.4,' SEC')
RETURN
END

C
C
FUNCTION GDENS(T,P)
C *** GDENS IS TAKEN FROM ISF-INSTITUTE LIBRARY
C *** THE DENSITY OF HELIUM IS CALCULATED FROM TEMPERATURE AND PRESSURE
C
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C DICHTE VON HELIUM
C DICHTE IN G/CM3
C T: TEMPERATUR IN GR.C
C P: DRUCK IN BAR
C
DIMENSION A(6)
DATA A/4.3E-4,5.42,1.7E-7,4.2E-3,25.3,1890./
DATA R/0.0207723/,T0/273.16/

C
TA=T+T0
RH=P/(R*TA)
AA=1./{(A(6)+TA)
B=A(1)+A(2)*AA
C=A(3)+(A(4)+A(5)*AA)*AA
RHO=(1.-RH*(B+C*RH))*RH
GDENS=RHO*1.E-3
RETURN
END

C
FUNCTION GVISC(T,P)
C
C *** GVISC IS TAKEN FROM ISF-INSTITUTE LIBRARY
C *** DYNAMIC VISCOSITY IS CALCULATED FROM TEMPERATURE AND PRESSURE
C
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C
C DYNAMISCHE ZAEHIGKEIT VON HELIUM
C ZAEHIGKEIT IN G/(CM S)
C T: TEMPERATUR IN GR.C
C P: DRUCK IN BAR
C
DIMENSION A(4)
DATA A/3.78E-7,2.848E-4,296.2,2.67E-10/
DATA R/0.0207723/,T0/273.16/

C
TA=T+T0
VS=A(1)*TA**0.69+A(2)/(A(3)+TA)
IF(P.LE.1.) GO TO 10
RH=P/(R*TA)
VS=VS+A(4)*RH**2
10 GVISC=VS*10.
RETURN
END

```

Anhang B

Anhang B umfaßt eine Loaderliste (Modulmap).

F64-LEVEL LINKAGE EDITOR OPTIONS SPECIFIED LIST.MAP
DEFAULT OPTION(S) USED - SIZE=(262144,98304)
IEW0000 INCLUDE MSS(GDENS,GVISC,CCCODE)
IEW0000 ENTRY PLAOUT

MODULE MAP

CONTROL SECTION			ENTRY							
NAME	ORIGIN	LENGTH	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION
PLACUT	00	178								
IOCGN	178	3C4								
INIT	540	978								
CONTRL	EB8	ACA								
VFUNC	19B8	456								
RUNP	10E0	151C								
RUNNAT	3300	DBA								
FTH	40C0	2CA								
ABEND	4390	438								
RSTART	47C8	1C0								
TADAP	4988	7FE								
NADAP	5188	5F6	TADAP0	5108	TADAPT	5148				
SUBOPT	5780	30A	NADAP0	56F4	NADAPT	5740				
SUBSET	5A90	2F0								
SUBST0	5D80	16E								
SUBRCL	5EF0	2C2								
GDENS	6188	216								
GVISC	63D0	22C								
CCCODE	6600	28								
IMCLEXP *	6628	3DC	IM\$DEXP	6628	DEXP	6628				
IMGEDI05*	6A08	EE2	DIUCS#	6A08						
IMHOLLGN *	78F0	200	DLGG	78F0	IM\$OLOG	78F0				
IMCLSQRT*	7BC0	170	DSQRT	78C0	IM\$DSORT	78C0				
IMCFDXPD*	7D30	698	FDXPD#	7D30						
IMOECOMM*	83C8	E30	IBCOM#	83FC	FDIUCS#	8488	INTSWICH	9140		
FICAP# *	91F8	61C	SEQDASD	98EA						
IMCCCMH2*	9818	9A5	LDFIO#	A1C0						
IMCLODFIC*	A1C0	DB0								
IMGLI02 *	AF70	4AE								
MASKE *	B420	18								
ZREAL1 *	B438	678								
ZREAL2 *	BAB0	474								

NAME	ORIGIN	LENGTH	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION	NAME	LOCATION
INFOCWT#	BF20	CFA	ADCON#	BF20	FCVLOUTP	BF9A	FCVLOUTP	BFAC	FCVZOUTP	BFC4
			FCVLOUTP	BFDC	FCVLOUTP	C014	FCVLOUTP	C014	ADCONI#	C724
			ADCON#	C720	INTGSRCH	CC21				
IMDEFINT#	CC28	800	ARITH#	CC28	ADJSWICH	D18C				
IMDEFIOB#	D428	118C	FIDCS#	D428	FIDCSBP	D42E				
IMOFIOB2#	ESB8	642	ERRMON	EC00	IMDERRE	EC18				
IMDERRM #	EC00	624								
IMQUATBL#	F228	638	FORPI#	FC38						
IMOUOPTY #	F860	3D8	FQCONI#	FDC8						
IMOFXPI#	FC38	190	FQCONO#	101E0						
IMOFCONI#	FDC8	416	IMOTRCH	10A98	ERRTK#	107A0				
IMOFCONO#	101E0	8B8								
IMOTRCH#	10A98	2AE	FTEN#	11310						
UERTST #	10048	5C8								
IMOFTEN #	11310	220								
UGETIO #	11530	14A								
GEOM	11680	1C								
UNIV	116A0	194D								
IC	12FF0	20								
CALC	13010	FA0								
OPTION	13F80	C								
ADAPT	13FC0	1C48								
FTACT	15C08	1C								

ENTRY ADDRESS 00

TOTAL LENGTH 15C28

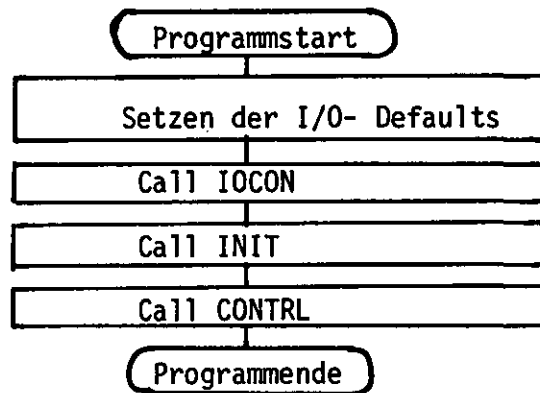
***MAIN DOES NOT EXIST BUT HAS BEEN ADDED TO DATA SET

AUTHORIZATION CODE IS 0.

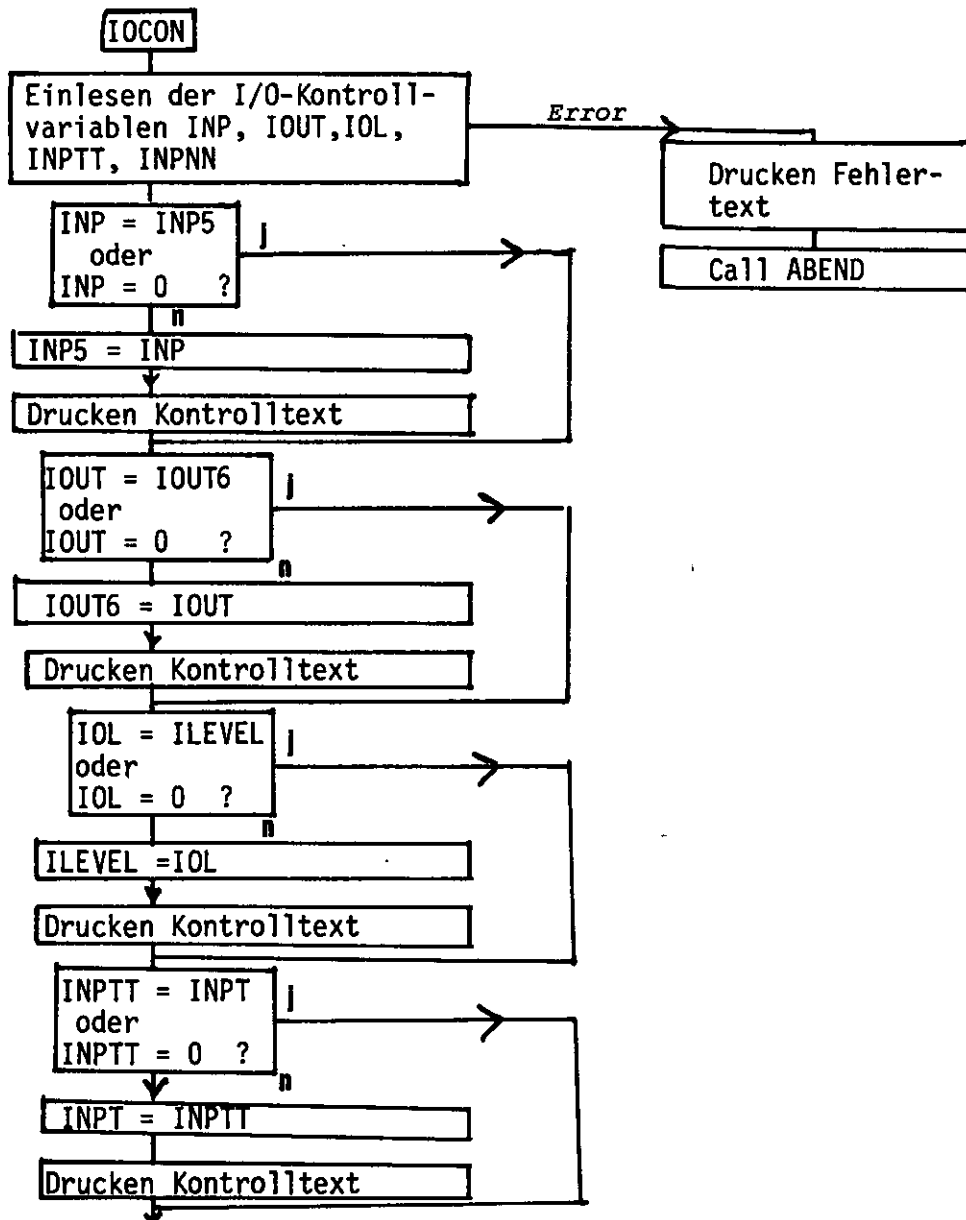
Anhang C

Anhang C enthält die Programmablaufbeschreibung.

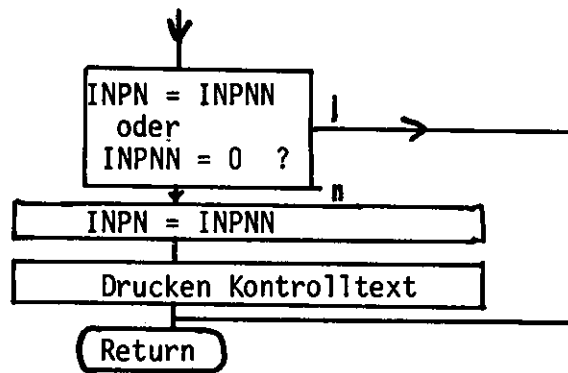
Programmodul MAIN



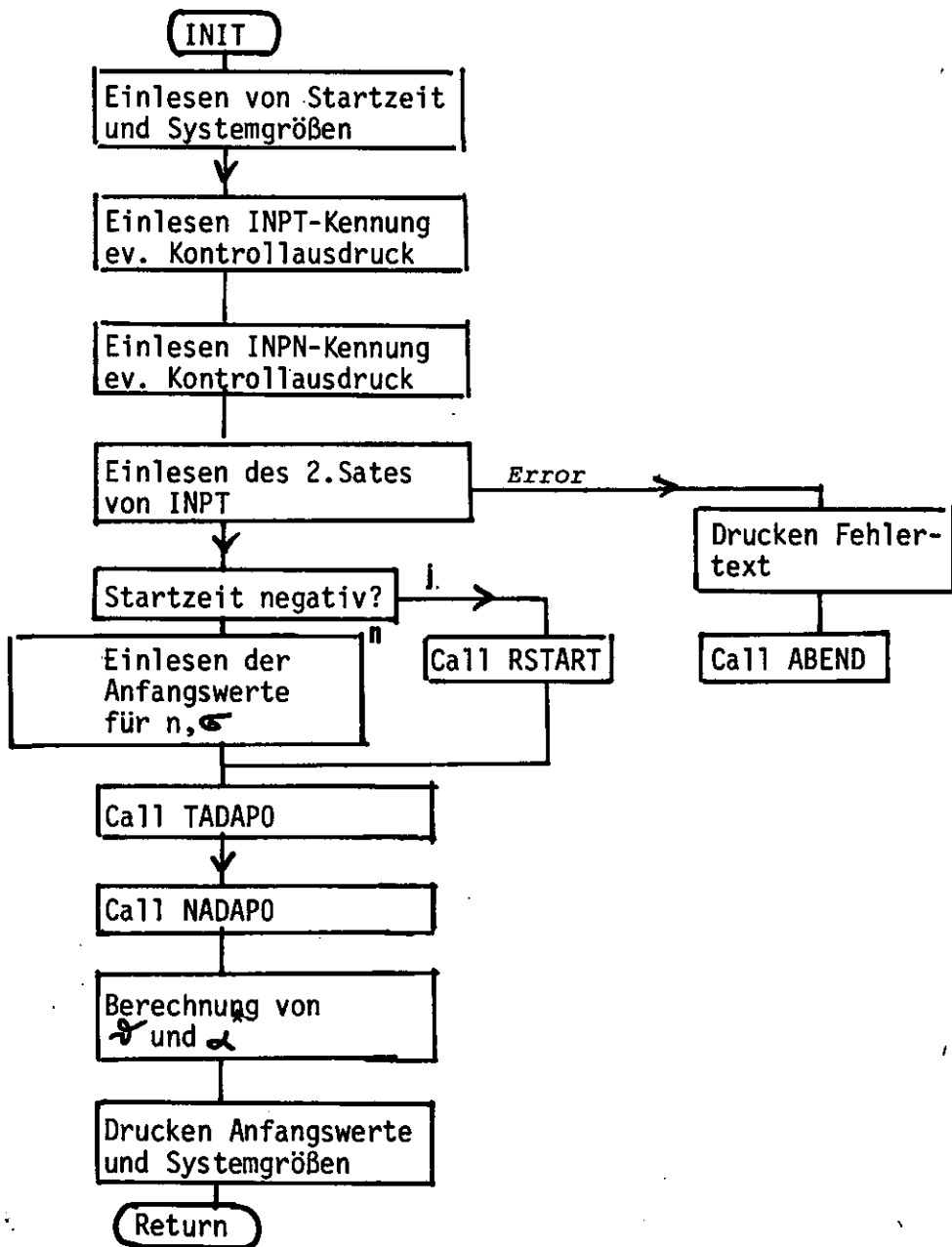
Programmodul IOCON



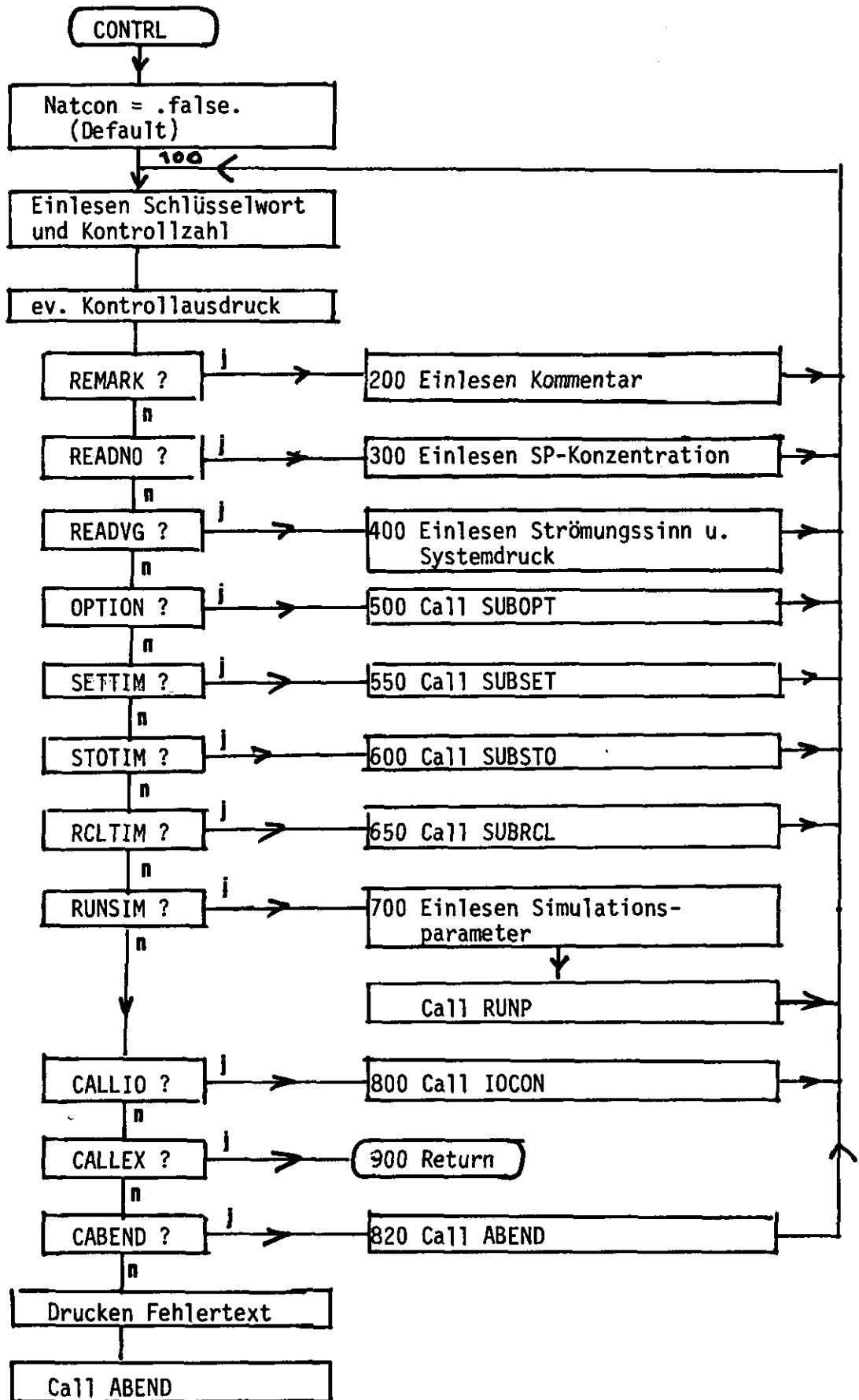
(Fortsetzung IOCON)



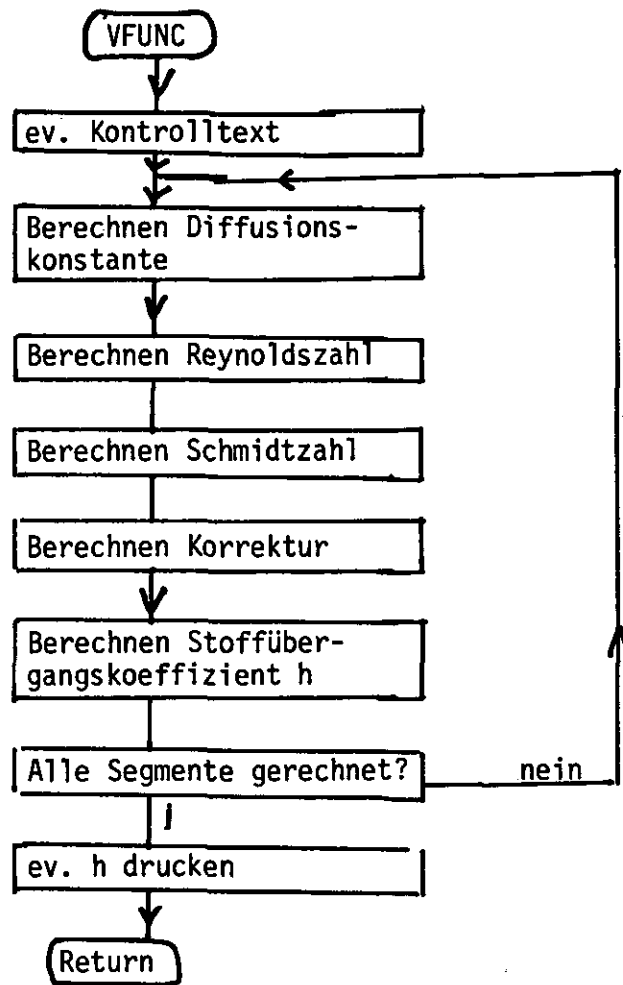
Programmmodul INIT



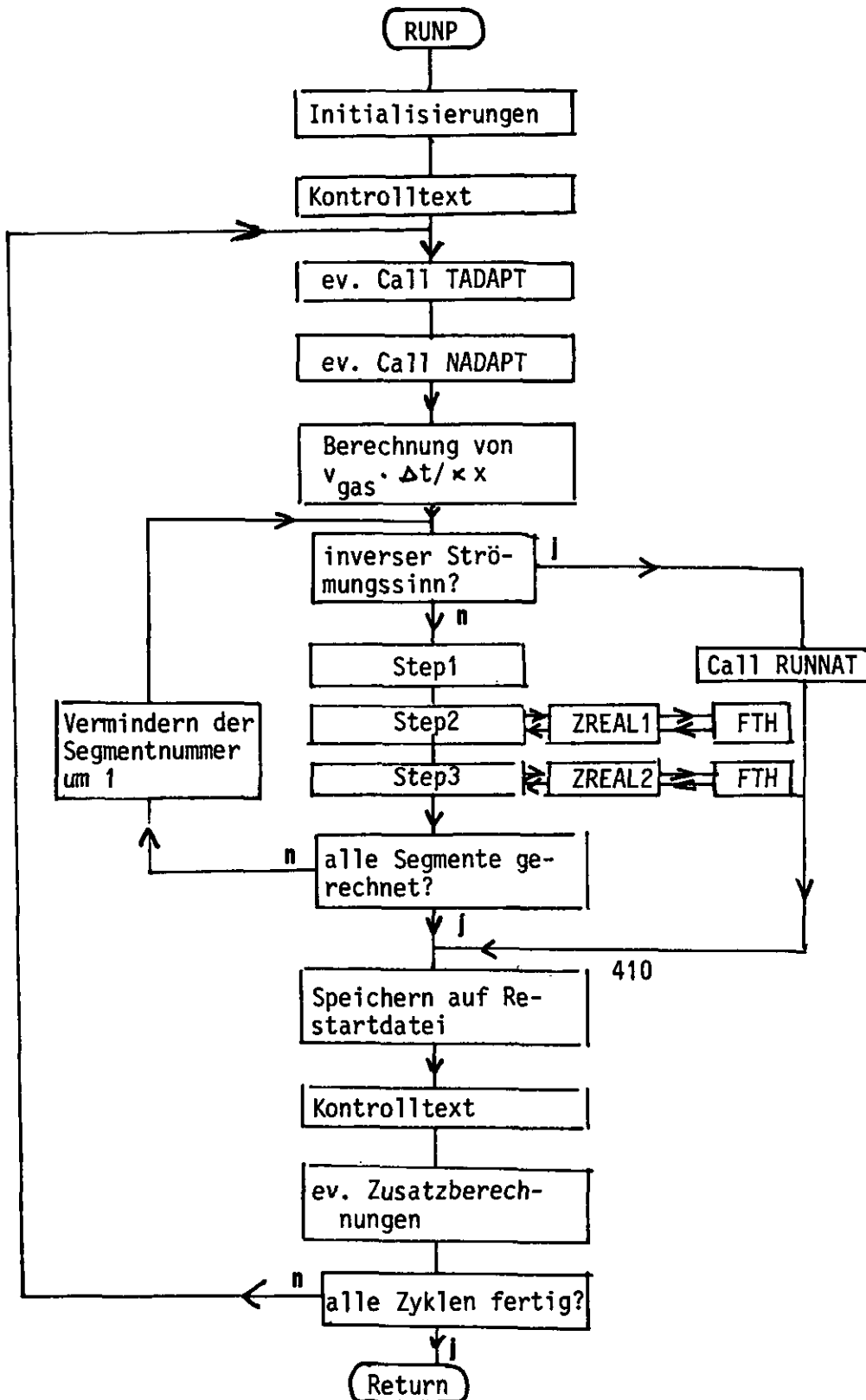
Programmmodul CONTRL



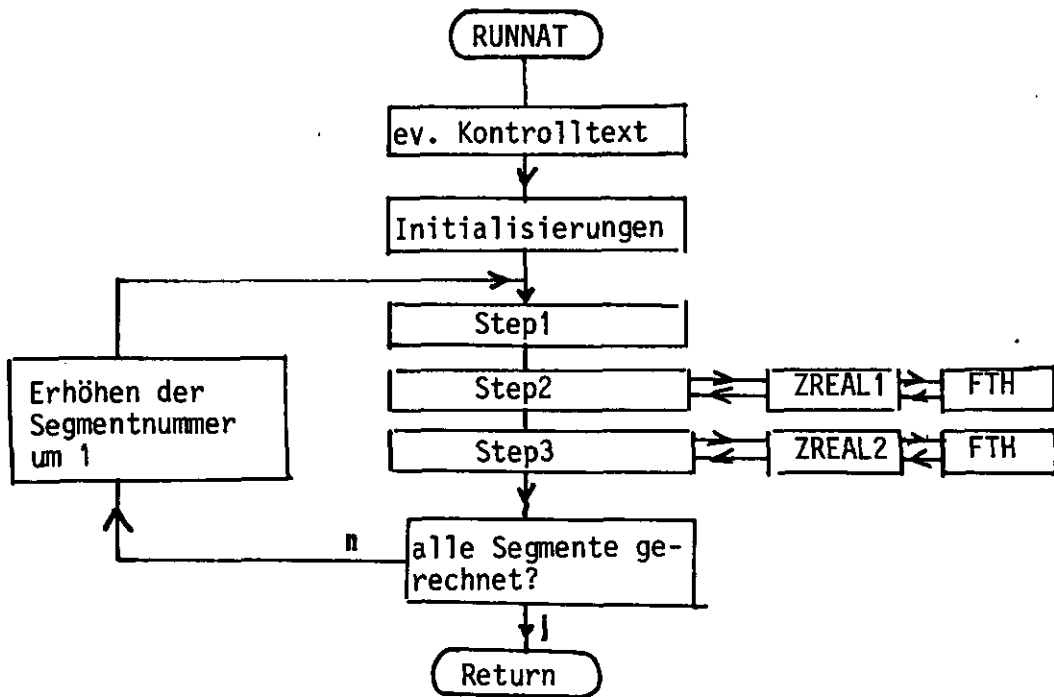
Programmodul VFUNC



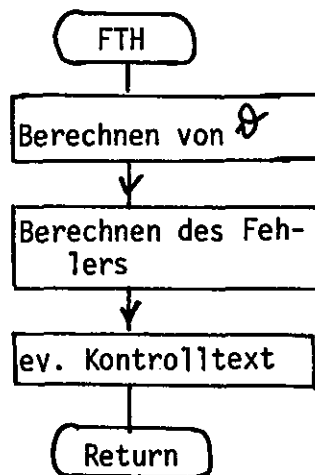
Programmodul RUNP



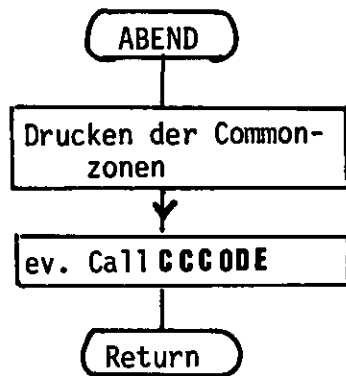
Programmmodul RUNNAT



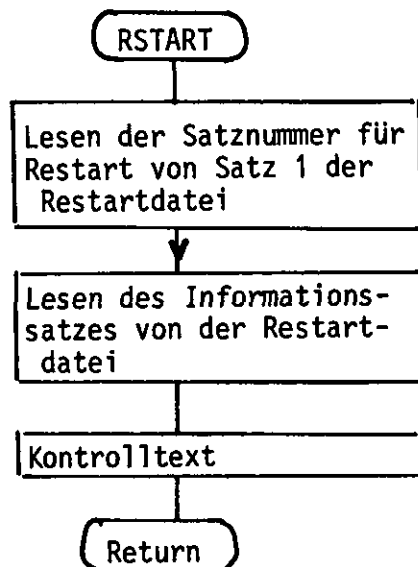
Programmmodul FTH



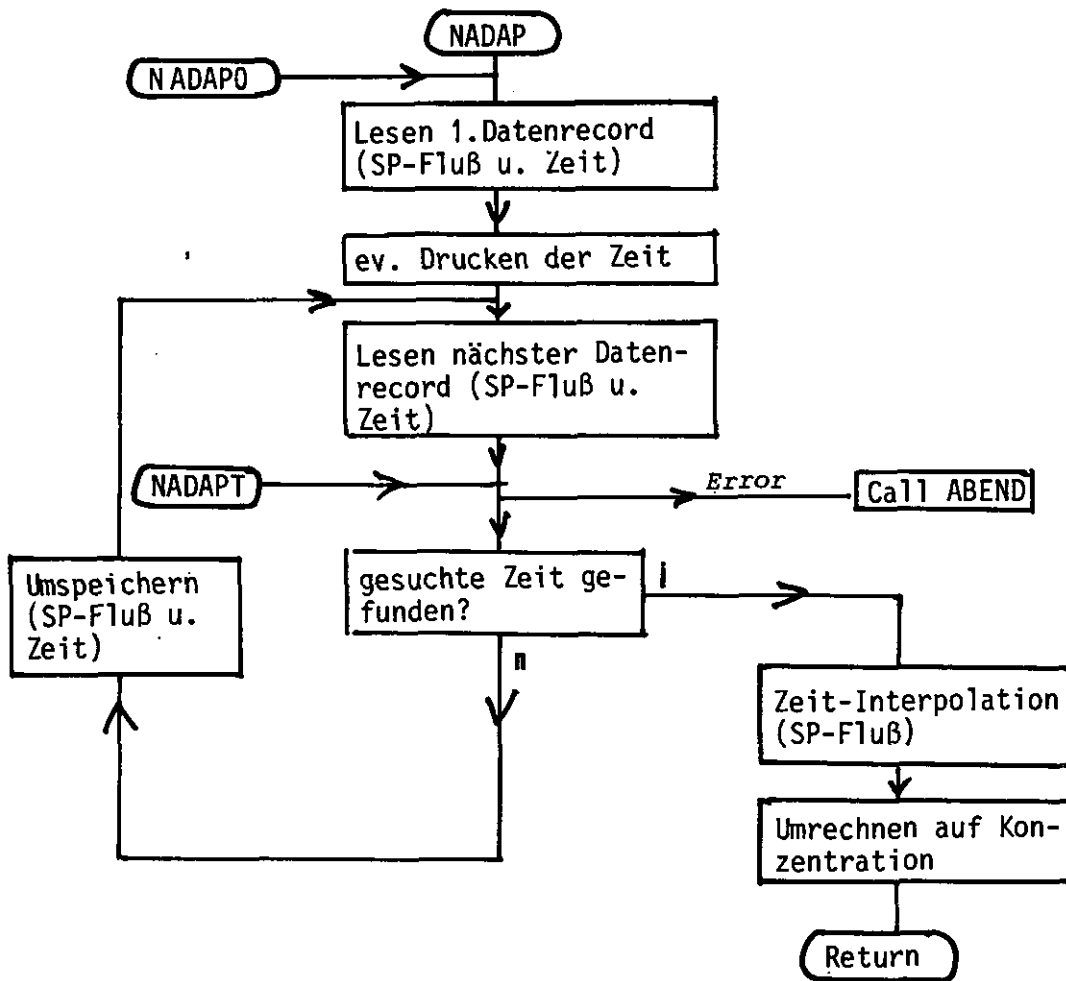
Programmmodul ABEND



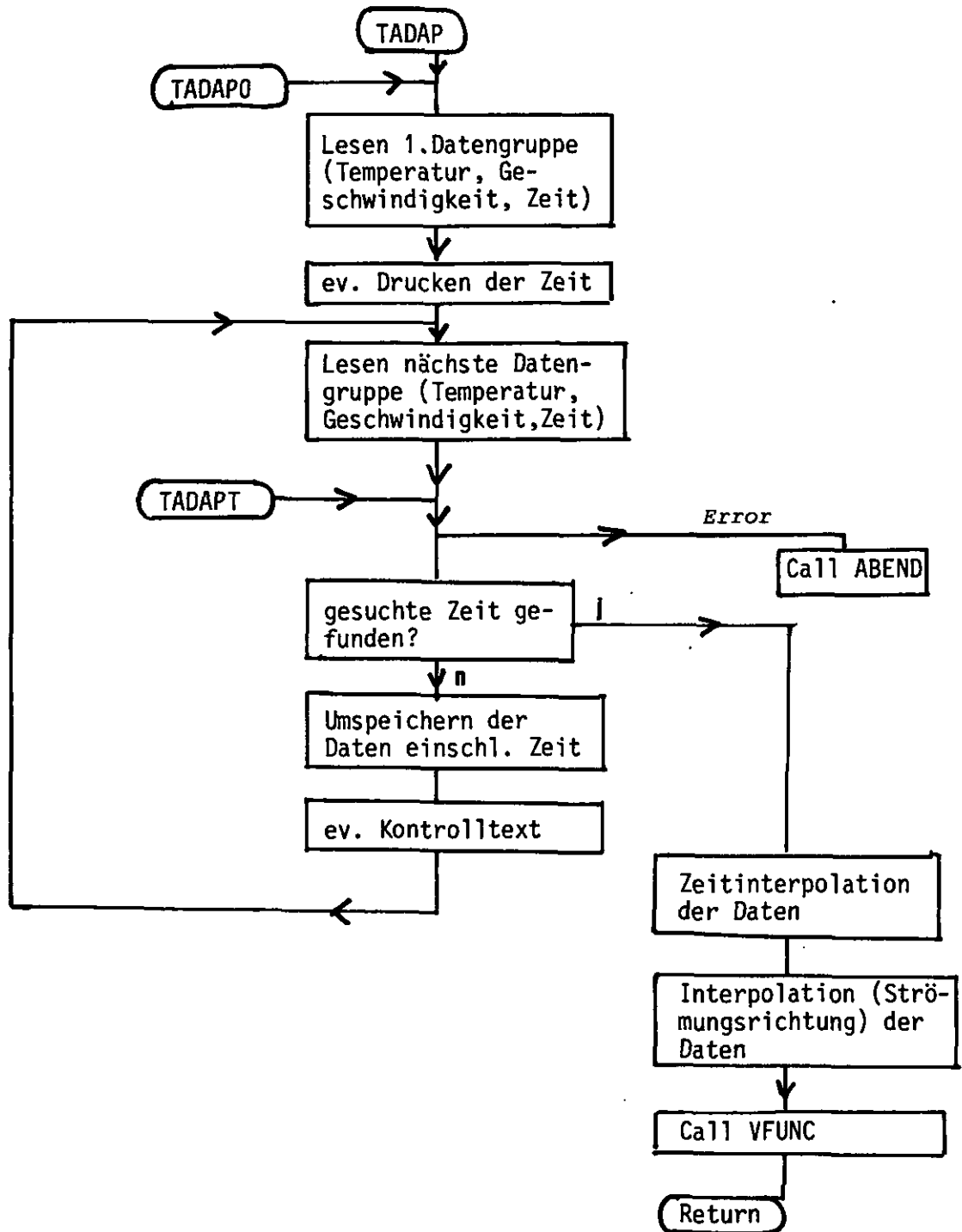
Programmmodul RSTART



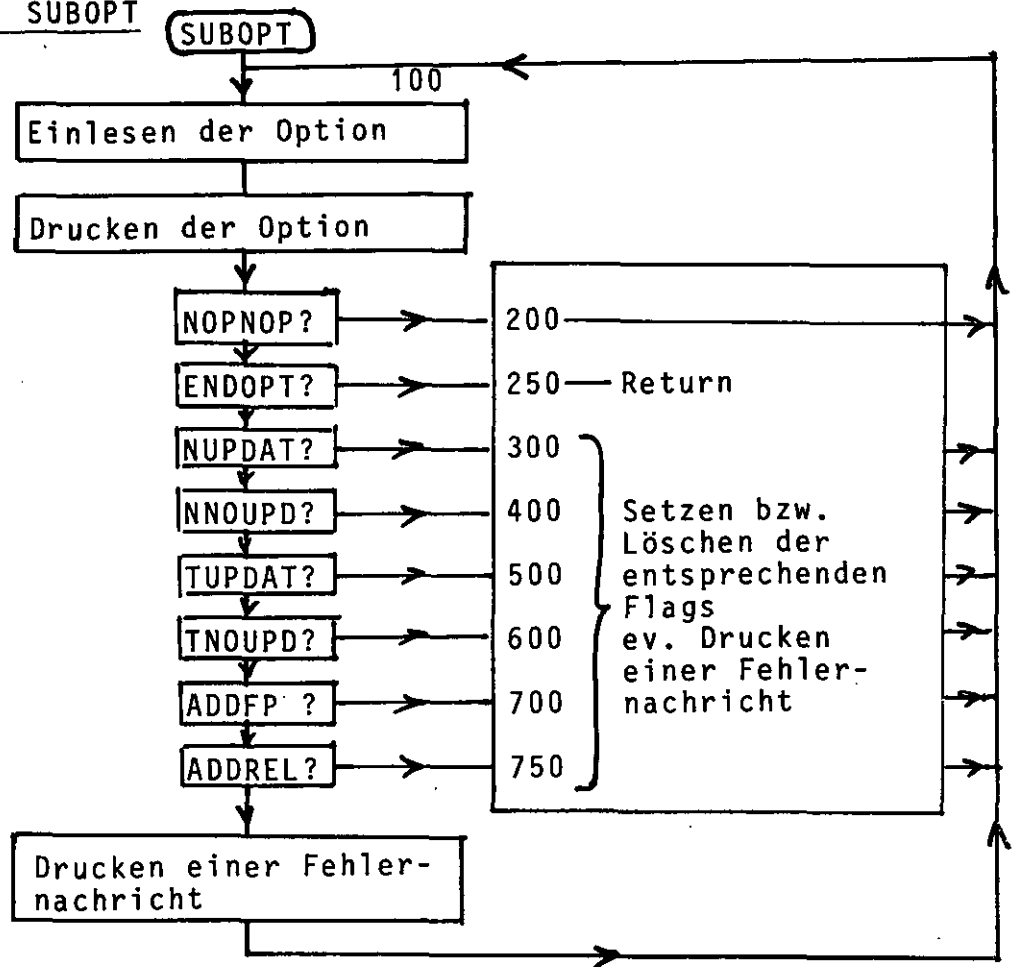
Programmmodul NADAP



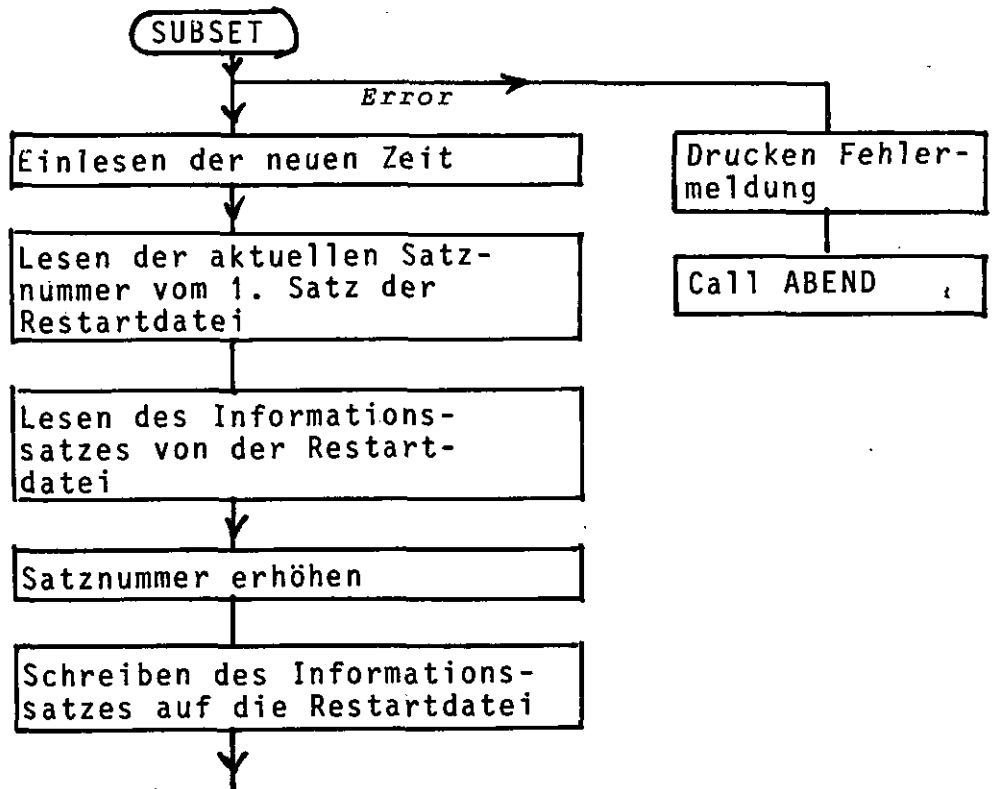
Programmmodul TADAP



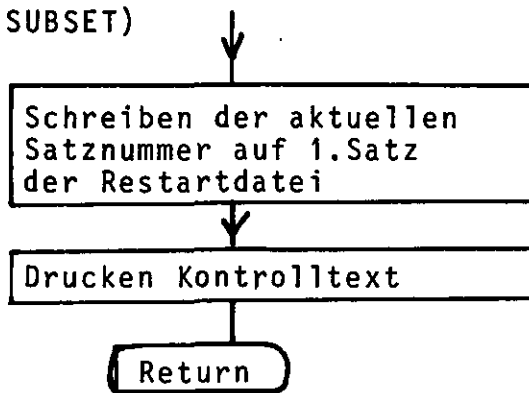
Programmmodul SUBOPT



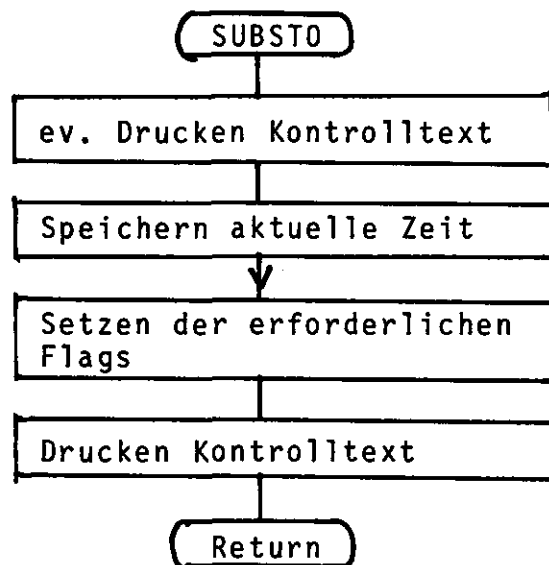
Programmmodul SUBSET



(Fortsetzung SUBSET)



Programmmodul SUBSTO



Programmodul SUBRCL

